

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce: **Anorganická chemie**
A 211, 9:00

Komise:
Předseda: doc. Ing. Vratislav Flemr, CSc.
Členové: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.
Ing. Filip Šaněk
Ing. David Petrádes, Ph.D. (Preciosa)
Ing. Aleš Strejc, Ph.D. (Moser)
Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Sekce: **Anorganická technologie**
Posluchárna č. A32, čas 9.00 hod.

Komise:
Předseda: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
Členové: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.
Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Martin Paidar, Ph.D.
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Kovové materiály I.**
hlavní chodba ústavu 106, 9-00

Komise:
Předseda: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.
Členové: Ing. Jan Šerák, Ph.D.
Ing. Hong Vu, Ph.D.

Sekce: **Kovové materiály II.**
hlavní chodba ústavu 106, 9-00

Komise:
Předseda: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.
Členové: doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.
Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Sekce: **Anorganické nekovové materiály I (plakátová)**
chodba ústavu skla a keramiky, přízemí, 9:00

Komise:
Předseda: prof. RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D.
Členové: doc. Ing. František Škvára, DrSc.
Ing. František Novotný, CSc.
Dr. Ing. Martin Míka
Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

- Sekce: **Anorganické nekovové materiály II (plakátová)
chodba ústavu skla a keramiky, přízemí, 9:00**
- Komise:
- Předseda: prof. Ing. Lubomír Němec, DrSc.
- Členové: doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst
doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.
Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.
Ing. Miroslav Rada, CSc. (organizační tajemník)
-
- Sekce: **Analýza a vlastnosti léčiv (přednášková)
A31, 8:15 hod**
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. František Kovanda, CSc. (108)
- Členové: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc. (108)
RNDr. Alexandr Jegorov, CSc. (Teva Czech Industries, s.r.o.)
doc. Ing. Barbora Doušová, CSc. (108)
Dr. Ing. Michal Hušák (108)
Ing. Lenka Seilerová (108, organizační tajemník)
-
- Sekce: **Organická chemie M1 (magisterská)
místnost A11, 9:15 hod.**
- Komise:
- Předseda: prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (TUL Liberec)
- Členové: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
Ing. Hana Kotoučová (PedF UK Praha)
Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma)
Ing. Ivan Veselý (Cayman)
doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
-
- Sekce: **Organická chemie M2 (magisterská)
místnost AS02, děkanát FCHT, 9:15 hod.**
- Komise:
- Předseda: prof. Ing. František Liška, CSc. (PedF UK Praha)
- Členové: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
Dr. Ing. Jana Hodačová
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.
Ing. Zdeněk Prošek (Synthon)
Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie M3 (magisterská)**
místnost A250, 9:15 hod.

Komise:
Předseda: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
Členové: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB AV ČR)
Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Hanuš Slavík (Momentive)
Ing. Radek Jurok (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie B1 (bakalářská)**
místnost A 278e, 9:15 hod.

Komise:
Předseda: doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc.
Členové: doc. RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK Praha)
Ing. Martin Skalický, Ph.D. (Apigenex)
Ing. Jan Velík (Cayman)
Ing. Libor Janečka (Merci)
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)
Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie B2 (bakalářská)**
místnost A 278c, 9:15 hod.

Komise:
Předseda: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
Členové: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)
Mgr. Martin Švec (Vitrum)
Ing. Jakub Sadílek (Ingos)
Ing. Tomáš Jursík (Alchimica)
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická technologie (plakátová, magisterská)**
posluchárna A 081a, 9:00 hod

Komise:
Předseda: doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.
Členové: Ing. Jiří Krupka, Ph.D. (tajemník)
Ing. Ladislav Kurc, CSc.
Ing. Vojtěch Fajt, Ph.D, MBA (GlaxoSmithKline)
Ing. Petr Jansa (Aroma Praha)
Ing. Martin Hradel (CB&I Lummus)

Sekce: **Výroba léčiv I (plakátová, magisterská)
chodba A přízemí (před A 01), 9:00 hod**

Komise:
Předseda: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.
Členové: Ing. Iva Paterová, Ph.D. (tajemnice)
doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Ing. Miroslav Petrisko, CSc.
Ing. Ivana Luštická
Ing. Eliška Žížková (Cayman Pharma)

Sekce: **Výroba léčiv II (plakátová, magisterská)
chodba A přízemí (před A 01), 9:00 hod**

Komise:
Předseda: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.
Členové: Ing. Martin Veselý (tajemník)
prof. Ing. Josef Horák, DrSc.
Ing. Jaroslav Šilhánek, CSc.
Ing. Marie Křivská
Ing. Dagmar Libertínová (Lach-Ner)

Sekce: **Výroba léčiv a organická technologie (bakalářská)
posluchárna A 01, 8:00 hod**

Komise:
Předseda: doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.
Členové: Ing. Jan Patera, Ph.D. (tajemník)
doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.
Dr. Jarmila Zbytovská
Ing. Kamila Syslová
Ing. Pavel Foret (Aroma Praha)

Sekce: **Chemie a technologie polymerů
posluchárna B 34, 8:30 hod.**

Komise:
Předseda: doc. Ing. Petr Sysel, CSc.
Členové: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.
Ing. Radka Kalousková, CSc.
Ing. Jan Merna, Ph.D.
Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.
Ing. Jana Kredatusová, Ph.D. (organizační tajemník)

- Sekce: **Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály
místnost B360, 9.00 hod.**
- Komise:
Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.
Členové: doc. Ing. Petr Macháč, CSc.
doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., Ústav polymerů
doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc., Ústav anorganické chemie
Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D., Katedra chemie, Univ.J.E. Purkyně
doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.
- Sekce: **Informatika a chemie
posluchárna č. A30, 14:00**
- Komise:
Předseda: doc. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.
Členové: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.
Ing. Jiří Znamenáček
RNDr. David Hoksza, Ph.D.
Ing. Jan Horníček
Ing. Bedřich Košata, Ph.D.; CZ.NIC
- Sekce: **Technologie restaurování I.
chodba v přízemí budovy A - u lab. č. 63, 10:30**
- Komise:
Předseda: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.
Členové: Ing. Jiří Děd, CSc.
Ing. Jan Stoulil, Ph.D.
Ing. Milan Kouřil, Ph.D.
Ing. Šárka Msallamová
- Sekce: **Technologie restaurování II.
chodba v přízemí budovy A - u lab. č. 65, 8:30**
- Komise:
Předseda: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.
Členové: Dr. Ing. Michal Ďurovič
Ing. Benjamin Bartl
- Sekce: **Restaurování a konzervování textilií
chodba v přízemí budovy A - u lab. č. 64, 8:30**
- Komise:
Předseda: doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.
Členové: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.
Ing. Klára Drábková
Bc. Jana Víchová, DiS., licencovaný restaurátor

Sekce: **Restaurování a konzervování skla a keramiky
chodba v přízemí budovy A - u lab. č. 64, 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Členové: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.
Ing. Alexandra Kloužková, CSc.
MgA. Milan Krajíček
Dr. Ing. Dana Rohanová
Aranka Součková Daňková, licencovaný restaurátor
Ljuba Svobodová, licencovaný restaurátor

Sekce: **Restaurování a konzervování kovů
chodba v přízemí budovy A u lab. č. 63, 8:30**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Ing. Jiří Děd, CSc.
Ing. Milan Kouřil, Ph.D.
Ivan Houska, licencovaný restaurátor
PhDr. Norbert Riegel
PhDr. Světlana Spiwoková

Sekce : Anorganická chemie

Likvidace odpadů z výroby bezolovnatých třaskavin

Autor: Andrea Hříbalová
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Libor Mastný, CSc.

V dnešní době v přímém spojení s legislativou REACH je na výrobce vyvíjen tlak na omezení výroby třaskavin obsahujících olovnatý kation. Jednou z možných alternativ je používání 2-diazo-4,6-dinitrofenolu - DDNP neboli Dinolu. Tato látka má základní strukturu velice podobnou olovnatým třaskavinám na bázi substituovaných fenolů.

V práci je popsána metoda likvidace odpadů a odpadních vod z výroby této bezolovnaté třaskaviny. Vzhledem k podobnosti skeletu byl použit stejný mechanismus likvidace odpadních vod jako v případě olovnatých sloučenin. Byl sledován vliv reakčních podmínek na rychlost a úplnost rozkladu bezolovnaté třaskaviny. Z výsledků vyplývá, že metoda likvidace odpadů z výroby třaskavin oxidací manganistanem draselným je v případě Dinolu plně akceptovatelná.

Sekce : Anorganická chemie

Úprava povrchu oceli pro výrobu Sollerových clon

Autor: Bc. Lenka Mikuličková
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Vratislav Flemr, Csc.

Sollerova clona je zařízení sloužící ke snížení divergence RTG-záření. Skládá se z paralelních fólií tvořících řadu úzkých štěrbin (v řádu desetin mm). Fólie musejí mít povrch s nízkou reflexivitou pro RTG-záření. K jejímu dosažení se používají materiály s vysokou schopností absorbce nebo s matným a drsným povrchem. Ve své práci jsem se věnovala chemické úpravě povrchu ocelové fólie tak, aby se dala použít na výrobu Sollerových clon. Vzhledem k velkému množství fólií na jednu clonu (40-80 podle šířky štěrbin) byl kladen důraz na jednoduchost úpravy, aby byla snadno reprodukovatelná a dalo se s ní upravit dostatečné množství fólií najednou. Některé metody, např. elektrochemické, byly předem vyloučeny. Byly proto použity různé kombinace leptání v kyselinách (HNO_3 , H_3PO_4) a chemického pokovování – mědění, niklování, stříbření, cínování. Původním záměrem bylo provádět úpravy povrchu v předem sestavené Sollerově cloně a obejít tak samostatnou úpravu jednotlivých fólií. Od toho bylo později upuštěno ve prospěch hromadné úpravy jednotlivých fólií. Optické vlastnosti vzorků upravených fólií byly měřeny na goniometru na Fyzikálním ústavu AV ČR.Ty, které měly nejlepší výsledky, pak byly použity na výrobu zkušebních Sollerových clon.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava termoelektrika $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Co}_{1.8}\text{O}_x$ různými sol-gel metodami.

Autor: Bc. Tomáš Hlásek
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, PhD.

Termoelektrická účinnost (ZT) je funkcí Sebeckova koeficientu, tepelné a elektrické vodivosti. Je tedy kromě jiného silně ovlivněná mikrostrukturou daného materiálu. Ve své práci jsem zkoumal vliv použité sol-gel metody a teplotního režimu rozkladu gelu na velikost částic prekursoru a na mikrostrukturu výsledného termoelektrika.

Jako vhodné jsou ty sol-gel metody, které eliminují hydrolýzu Bi^{3+} . Použil jsem chelatační sol-gel metodu založenou na polyesterifikaci EDTA (kyselina ethylendiamintetraoctová) a TEA (triethanolamin), a dále dvě sol-gel metody, které používají ve vodě rozpustné polymery PEI (polyethylenimin) a PAAM (polyakrylamid).

Teplotní režimy rozkladu byly stanoveny na základě TG/DTA analýz. Zkoumal jsem vliv atmosféry použité při rozkladu na velikost částic prekursoru. Porovnávány byly rozklady na vzduchu a rozklady v dusíku následované výpalem v kyslíku. Velikost částic byla porovnávána ze SEM fotografií. Fázové složení prekursorů i sintrovaných vzorků bylo ověřeno pomocí RTG difrakce. U sintrovaných vzorků byly naměřeny teplotní závislosti transportních vlastností a spočítány teplotní závislosti termoelektrické účinnosti ZT. Mikrostruktura byla porovnávána na snímcích ze SEM.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava tenkých filmů LiNbO_3 na krystalické substráty

Autor: Bc. Martina Chvalová
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph. D.

Tenké vrstvy niobičnanu lithného na krystalických substrátech je možno připravovat mimo jiné sol-gel metodami vycházejícími z alkoxidů. Limitující pro tyto metody je omezená možnost, jak připravit výchozí roztoky alkoxidů niobu a lithia a také jejich vysoká reaktivita. Pro mou práci byly vybrány deriváty 2 - methoxyethanolu pro jejich menší reaktivitu s vodou. Tyto sloučeniny lithia a niobu byly připravovány různými postupy; výsledné produkty byly analyzovány pomocí infračervené spektroskopie. Koncentrace lithia ve výsledném roztoku alkoxidů byla stanovována pomocí fluorimetrie nebo titrace.

Následně byly testovány různé doby refluxu směsi obou alkoxidů. Byla sledována reaktivita směsných alkoxidů s vodou. Po zvolení nejlepší možné cesty přípravy směsného alkoxidu Li-Nb byly nanášeny první tenké vrstvy na krystalické substráty, v našem případě safír s orientací 0001. Pro nanášení byly použity metody dip- a spin-coatingu. U první jmenované metody byly zkoušeny různé doby stání po nanesení a různé teplotní režimy výpalu jednotlivých vrstev. U spin-coatingu byly zkoušeny různé rychlosti otáčení a různé množství nanášeného roztoku. Získané vzorky byly pozorovány na optickém mikroskopu a SEM; byla provedena také RTG fázová analýza.

Sekce : Anorganická chemie

LiNbO₃ targety pro PLD připravené metodou sol-gel

Autor: Jakub Erben
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

LiNbO₃ je ideálním kandidátem pro využití v optice. Jeho optické vlastnosti jsou ovlivnitelné přidávkou iontů optoaktivních prvků, jako je Er³⁺ nebo Yb³⁺. Lze ho tak připravit na míru velmi specifickým využitím. Ta mohou představovat většinu běžných optických aplikací od vlnovodů (vlákna pro komunikaci) až po silné lasery (v objemu rozptýlené ionty Er³⁺).

Tato práce je zaměřená na získání matrice odpovídajících vlastností nezbytných pro využití niobátu lithného jako targetu pro přípravu tenkých vrstev pomocí pulzní laserové depozice (PLD). Je žádoucí, aby target pro PLD měl maximální běžně dosažitelnou hustotu a byl fázově homogenní.

Práce zahrnuje dvě hlavní roviny: získání LiNbO₃ odpovídající mikrostruktury a účinné dotování ionty Er³⁺. Pro získání homogenní matrice byla zvolena příprava metodou sol-gel založenou na Pechiniho polyesterifikaci. Byl testován rozklad prekurzorů v různých atmosférách (v N₂ se organické prekurzory rozpadají na amorfni uhlík a následně jsou oxidovány v O₂ atmosféře nebo na vzduchu). Získané vzorky byly charakterizovány pomocí SEM. Nezávisle na předchozím byly připraveny vzorky LiNbO₃ s přidávkou iontů Er³⁺ a následně i Yb³⁺. Po slinování bylo jejich fázové složení určeno pomocí XRD.

Sekce : Anorganická chemie

Vliv chloridových iontů na elektrokatalytickou aktivitu kompozitu vodivý polymer/Pt

Autor: Michal Kamrádek
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: RNDr. Petr Holzhauser, Ph.D.

Vodivé polymery jsou jedinečnou skupinou materiálů vykazující iontovou i elektronovou vodivost. Vzhledem ke svým vlastnostem jsou kompozity vodivý polymer/platina (CP/Pt) zkoumány jako materiály pro modifikaci elektrod. Příkladem je jejich využití na pozici anody v palivovém článku pro katalytickou elektrooxidaci vodíku či methanolu.

I přesto, že sorpce chloridových iontů na povrch platiny je známým faktem, a lze tedy očekávat výrazné ovlivnění katalytické aktivity kompozitu CP/Pt těmito ionty, komplexní studie na toto téma doposud nebyla provedena.

Náplní práce je optimalizace syntézy kompozitů CP/Pt, jejich příprava a charakterizace a následné studium vlivu chloridových iontů na elektrokatalytickou oxidaci vodíku a methanolu. Testovány byly dva nejlépe popsane vodivé polymery, a to polyanilin a polypyrrol. K charakterizaci kompozitů jsem využil metody elektrochemické, zejména cyklickou voltametrii, a elektronovou mikroskopii. Pro stanovení aktivit jsem využil standardní potenciostatické metody.

Sekce : Anorganická chemie

Automatizace zjišťování vybraných charakteristik polovodičů na základě Hallova jevu

Autor: Jiří Pinkava
Ročník: M1
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Měření rezistivity, pohyblivosti a koncentrace volných nositelů náboje patří mezi základní charakterizační techniky pro polovodičové materiály. Hallův jev je založen na vzniku elektrického napětí na vodiči umístěném v magnetickém poli, kterým protéká elektrický proud. Hallovo napětí se indukuje ve směru kolmém jak ke směru procházejícího elektrického proudu tak ke směru magnetické indukce.

K měření Hallova napětí a rezistivity byla zkonstruována aparatura vybavená vícekanálovým multimetrem a řízenými zdroji proudu propojenými pomocí rozhraní RS-232 a GPIB s počítačem. Pro měření byla zvolena čtyřbodová Van der Pauwova metoda umožňující eliminovat vliv nesymetrického tvaru vzorku a kontaktů. Cílem práce byla konstrukce aparatury a vytvoření software, který maximálně zjednoduší a automatizuje měření a následné zpracování a vyhodnocení získaných dat. Vytvořený software zprostředkuje interakci s uživatelem pomocí grafického rozhraní, jež umožňuje jak zadávání parametrů měření, tak i průběžnou vizualizaci získaných výsledků v grafu a následný export dat. Pro tvorbu byl použit programovací jazyk C++ s využitím knihovny Qt4. Zkonstruované zařízení spolu s vytvořeným programovým vybavením bylo použito pro měření transportních vlastností tenkých vrstev polovodičů.

Sekce : Anorganická chemie

Erbium ve struktuře niobičnanu lithného a jeho luminiscenční vlastnosti

Autor: Jakub Cajzl
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

Niobičnan lithný dotovaný erbiem ($\text{Er}:\text{LiNbO}_3$) je ve fotonice velmi studovaným materiálem. Jeho výjimečné vlastnosti totiž dovolují současné modulování a zesilování optického záření ($\lambda = 1,5 \mu\text{m}$). Techniky dotování LiNbO_3 erbiem je možné rozdělit na objemové dotování a dotování tenké povrchové vrstvy. Tato práce je soustředěna především na vztahy mezi technologií vytváření erbiem dotované tenké vrstvy a luminiscencí v oblasti okolo $1,5 \mu\text{m}$, kde pozice erbia ve struktuře krystalu je klíčovým faktorem. K dotování LiNbO_3 erbiem byly využity techniky: vysokoteplotní difúze z napařené kovové (Er) a oxidické (Er_2O_3) vrstvy, difúze z taveniny za různých teplot, difúze z taveniny v elektrickém poli a iontová implantace. Výsledné vlastnosti byly srovnány i s objemově dotovaným $\text{Er}:\text{LiNbO}_3$. Důraz byl kladen také na studium procesu žhání dotovaných vzorků za různých teplot. U připravených vzorků byly zjišťovány hloubkové koncentrační profily erbia (metoda RBS), luminiscence v oblasti od 1440 do 1600 nm, úbytek lithia v povrchové vrstvě (metoda NDP), stupeň neuspořádanosti krystalové struktury (metoda RBS/Channeling) a počet vedených vidů (metoda m-line). Z výsledků plyne, že pokud je erbium v substituční poloze, je okolí erbia uspořádané a intenzita luminiscence je vysoká. Míru uspořádanosti struktury také pozitivně ovlivňuje zvyšující se teplota žhání.

Sekce : Anorganická chemie

Charakterizace vzorků oxidu grafitu metodou cyklické voltametrie

Autor: Veronika Číková
Ročník: M1
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Grafen patří mezi velmi perspektivní nanomateriály. Tato modifikace uhlíku se vyznačuje dvojdimenzionální strukturou, která určuje jeho mimořádné chemické a fyzikální vlastnosti. Aplikační potenciál grafenu spočívá zejména v oblasti mikroelektroniky, senzorové techniky pro chemické a biochemické senzory, superkapacitátorů, kompozitních materiálů a biomedicínské aplikace. Použití grafenu pro elektrochemické senzory spočívá v nízké rezistivitě a vysoké pohyblivosti elektronů v dvojdimenzionálních rovinách. Přenos elektronů z roztoku probíhá přednostně na hranách a defektech grafenových rovin.

Výchozí látkou pro přípravu grafenu byl oxid grafitu (GO) připravený oxidací grafitu pomocí $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4/\text{KClO}_3$. Grafen byl připravován redukcí GO pomocí rychlého ohřevu na vysokou teplotu – tepelnou exfoliací, elektrochemickou redukcí a chemickou redukcí. Tepelná exfoliace GO byla prováděna rychlým ohřevem ($1000\text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$) v atmosféře Ar a H_2 . Chemická redukce GO byla prováděna hydrazinem. Elektrochemická redukce byla probíhala in-situ v potenciostatu před vlastní elektrochemickou charakterizací. Elektrochemická charakterizace byla prováděna metodou cyklické voltametrie s $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$. Grafen byl charakterizován pomocí Ramanovy spektroskopie a rentgenové fotoelektronové spektroskopie.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava kvantových teček CdS a CdSe

Autor: Pavla Hošínská
Ročník: M1
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Kvantové tečky - nanočástice polovodičů typu AIIIVI představují velmi perspektivní materiál pro široké spektrum aplikací z oblasti optoelektroniky, optiky, fotovoltiky, biochemie a biomedicíny. Širší aplikační využití umožňuje také relativní nenáročnost jejich přípravy a možnost ovlivnění energie zakázaného pásu změnou složení. Kvantové tečky polovodičů CdS a CdSe byly připraveny v bezvodých rozpouštědlech. Výchozími látkami byly CdO, Se a S. Jako rozpouštědlo a surfaktant byl použit 1-oktadecen a kyselina olejová. Pro rozpuštění Se byl použit trioktylfosfan, který slouží současně jako surfaktant. Syntéza probíhala při $225\text{ }^\circ\text{C}$ pod inertoní atmosférou. Velikost částic CdSe je závislá na reakční době, zatímco v případě CdS závisí pouze na koncentraci surfaktantu - kyseliny olejové.

Pro charakterizaci kvantových teček byla použita UV/VIS spektrofotometrie a UV/VIS fluorimetrie. Naměřená data byla použita pro výpočet velikosti kvantových teček. Měření velikosti nanočástic a zeta potenciálu bylo provedeno metodou dynamického rozptylu světla s použitím He-Ne laseru (633 nm). Pro měření zeta potenciálu byly nanočástice separovány centrifugací a suspendovány v deionizované vodě. Izoelektrický bod suspenze nanočástic byl stanoven titrací s $0,1\text{M NaOH}$ a $0,1\text{M HCl}$.

Sekce : Anorganická chemie

Studium vlivu kyslíku na vlastnosti silikátových skel implantovaných ionty mědi, stříbra a zlata

Autor: Soňa Vytykáčová
Ročník: B3
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Blanka Švecová, Ph.D.

Skla obsahující kovové částice velmi malých rozměrů ($\approx$ nm) patří mezi jedny z nejstarších kompozitních materiálů. Vzhledem k tomu, jak v současné době roste zájem o materiály vykazující nelineární optické vlastnosti, nejsou už skla obsahující kovové nanočástice používána jen k dekorativním účelům, ale našla své uplatnění i ve fotonice. Tenkou povrchovou vrstvou bohatou na kovové nanočástice lze ve sklech nejlépe připravit iontovou implantací. Nastavením podmínek implantace a výběrem implantovaného iontu lze ovlivnit parametry implantované vrstvy a nanočástic, a tedy i výsledné nelineární optické vlastnosti materiálu.

V minulých letech byl na našem pracovišti prokázán vliv skelné matrice na distribuci kovových nanočástic a výsledné optické vlastnosti. V této práci jsou studovány vztahy mezi strukturou a složením materiálu a výslednými optickými vlastnostmi silikátových skel, do kterých jsou implantovány ionty mědi, stříbra nebo zlata pro tvorbu nanočástic a ionty kyslíku pro případné ovlivnění oxidačního stavu implantovaného iontu kovu. K charakterizaci vlastností byly použity následující metody: RBS, absorpční spektroskopie a Ramanova spektroskopie. Ukázalo se, že významným faktorem ovlivňujícím dolet implantované částice je nejenom výběr implantovaného iontu, ale i struktura, resp. stupeň zesíťení skelné matrice.

Sekce : Anorganická technologie

Tuning the selectivity in the hydrogenation of 4-nitrostyrene using self-assembled monolayers (SAMs)

Autor: Václav Bumbálek
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: prof. Dr. Jeroen A. van Bokhoven

Functionalized anilines are important substrates for the production of many agrochemicals, pharmaceuticals, polymers, pigments and fine chemicals. They are generally produced by catalytic hydrogenation of nitro compounds. The selective reduction of these nitro aromatics is challenging task when other reducible groups are present in the molecule due to the fact that conventional transition metal catalysts have tendencies to reduce all groups. It was found that gold supported on various metal oxides exhibits high selectivity towards hydrogenation of nitro group. In our work we try to change the selectivity of this catalyst to another reducible group by modifying the surface by alkanethiol self-assembled monolayers (SAMs). We would like to build channels from SAMs of different length on gold surface and with different functionalities in order to prevent the adsorption of nitro group on the surface and force the catalyst to hydrogenate other groups.

Sekce : Anorganická technologie

Filtrace tuhých částic v procesu sanace podzemních roztoků po těžbě uranu

Autor: Bc. Jan Franz
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

V DIAMO, s.p. Stráž pod Ralskem se několik desítek let těžil uran podzemním loužením ložiska kyselinou sírovou. Zbytkové technologické podzemní roztoky po těžbě obsahují především síran hlinitý, síran železnatý, síran amonný a volnou kyselinu sírovou. V současné době probíhá likvidace a rekultivace vyluhovacích polí a rozsáhlá sanace zasaženého horninového prostředí. Sanace je řešena řízeným čerpáním a čištěním zbytkových technologických roztoků dvoustupňovou neutralizací kyselých roztoků hydroxidem vápenatým.

Po prvním stupni neutralizace je suspenze přiváděna do kalolisů, kde se oddělí vzniklý sádrovec. V této fázi procesu se plachetky velmi rychle zanáší, narůstá tlaková ztráta filtrace a dochází k narušování celistvosti plachetek.

Cílem této práce je nalezení nejvhodnějšího regeneračního činidla k čištění plachetek kalolisů, aby se zvýšila jejich životnost. Bylo sestrojeno laboratorní filtrační zařízení, vypracován jednoduchý filtrační test a vyzkoušeno 27 regeneračních roztoků. Nejlepší výsledky byly pozorovány u HF a HCl. Předpokládá se, že tímto způsobem by se měla zkrátit průměrná doba filtračního cyklu a životnost filtrační plachetky by se měla prodloužit až na 4000 cyklů.

Sekce : Anorganická technologie

Chemická kompatibilita katod s elektrolytem pro vysokoteplotní palivový článek

Autor: Bc. Filip Karas
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Assoc. prof. Hilde Lea Lein, Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Vysokoteplotní palivové články s pevnými oxidy (SOFC) jsou v posledních letech intenzivně studovány, jako nadějná technologie budoucí výroby elektrické energie. To je dáno především jejich vysokou konverzí chemické energie na energii elektrickou. Jejich další velkou předností je, že jako katalyzátory nemusí používat platinové kovy. Podle druhu iontů transportovaných elektrolytem rozdělujeme SOFC články do dvou skupin. První je častější typ transportující oxidové anionty, méně časté jsou pak protonově vodivé články. Aby byly tyto systémy schopny konkurovat stávajícím technologiím výroby elektrické energie, je nutné snížit výrobní náklady a optimalizovat způsob jejich výroby. Nejprve je však nezbytné najít vhodné materiály s optimálními parametry. Jedním z problémů ve vztahu k materiálům článku může být jejich vzájemná kompatibilita. Při dlouhodobém provozu může dojít k chemické reakci, jejíž produkty negativně ovlivňují výkon článku. Cílem mé práce bylo proto zkoumání chemické kompatibility protonově vodivých elektrolytů LaNbO_4 a $\text{La}_{5,6}\text{WO}_{12-d}$ v závislosti na složení katodového materiálu $\text{LaCo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_4$.

Sekce : Anorganická technologie

Vliv podmínek elektrolýzy na strukturu a vlastnosti membrány Nafion

Autor: Šárka Kubíková
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, Ing. Jakub Mališ

Membrány typu Nafion jsou tvořeny chemicky a mechanicky odolným sulfonovaným perfluorovaným polymerem, a proto nacházejí uplatnění v nejrůznějších aplikacích, jako jsou elektrolýza solanky, vody, elektrochemické kompresory a palivové články.

V případě elektrolýzy vody se uvažuje o zvýšení provozních teplot na hodnoty 100 - 160 °C za současného zvýšení tlaku. Jako problematická se v této souvislosti podle literárních údajů [1] jeví degradace membrány vedoucí k poklesu její iontové vodivosti.

V rámci uvedené práce byla použita IČ spektroskopie k ověření uvedené teorie. Jak vyplynulo z výsledků, vlivem zvýšené teploty a tlaku nedochází k chemické degradaci polymeru. Pozorovaný pokles vodivosti je zřejmě způsoben nadměrným zbotnáním membrány. To potvrzují změny rozměrů vzorku v průběhu expozice, které jsou v souladu s pozorovanými změnami vodivosti. S cílem potvrdit uvedenou teorii byla provedena série měření iontové výměnné kapacity vzorků membrány před a po expozici definovaným podmínkám.

1] Kelly M.J., Egger B., Fafilek G., Besenhard J.O., Kronberger H., Nauer G.E., Conductivity of polymer electrolyte membranes by impedance spectroscopy with microelectrodes, Solid State Ionics 176 (2005) 2111

Sekce : Anorganická technologie

Příprava anody pro alkalickou elektrolýzu vody

Autor: Martin Prokop
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Alkalická elektrolýza je v současné době jediný způsob elektrolýzy vody využívaný v průmyslovém měřítku. Vzhledem k vysoké ceně elektrické energie je třeba snižovat energetickou náročnost procesu. Jednou z možností je modifikace niklové anody katalyzátorem. Přítomnost katalyzátoru snižuje přepětí reakce vývoje kyslíku a tím zvyšuje energetickou efektivitu elektrolýzy.

Cílem práce je vývoj metodiky nanášení katalytické vrstvy na niklovou difúzní vrstvu při přípravě anody pro alkalickou elektrolýzu vody. Zkoumaný katalyzátor je na bázi nikl - kobaltových spinelů a jeho příprava je rovněž součástí práce. Připravené anody jsou testovány v laboratorním elektrolýzáru a jejich morfologie před a po elektrolýze je zkoumána pomocí XRD a SEM mikroskopie. S experimentálními anodami bylo dosaženo vyšší intenzity procesu při zachování provozního napětí elektrolýzáru.

Sekce : Anorganická technologie

Provozní charakteristiky alkalické elektrolýzy vody s membránou Nafion

Autor: Martin Roubalík
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Ing. Karel Vazač

Vodík je stále zmiňován jako palivo budoucnosti, které by mělo v blízké době nahrazovat fosilní paliva. Avšak většina vyrobeného vodíku v dnešním světě pochází z přeměny fosilních paliv. Další zdroj vodíku je voda a její průmyslové zpracování alkalickou elektrolýzou. Komplikací využití tohoto procesu výroby vodíku je skutečnost, že jeho energetické nároky nemohou konkurovat zavedeným postupům výroby, i když elektrolyticky vyrobený vodík je vysoce čistý a tudíž vhodný pro řadu speciálních aplikací.

Jednou z možností je použití kation-selektivní polymerní membrány typu Nafion v alkalickém prostředí. Přidanou hodnotu tohoto řešení představuje koncentrační změna během elektrolýzy. Na druhou stranu je předpokládána nižší mobilita Na^+/K^+ iontů v membráně Nafion oproti mobilitě OH^- iontů v případě použití anexových membrán. Byl studován vliv použité koncentrace a typu hydroxidu na účinnost procesu elektrolýzy.

Sekce : Anorganická technologie

Porovnávání spinelových katalyzátorů pro alkalickou elektrolýzu vody

Autor: Martin Tkáč
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Ing. Jaromír Hnát

Vodík je v současné době považován za jeden z perspektivních energetických nosičů v rámci konceptu vodíkové ekonomiky. Z tohoto důvodu, je třeba najít technologicky i ekonomicky dostupný způsob jeho získávání, nezávislý na nerostných surovinách. Jednu z možností představuje alkalická elektrolýza vody, využívající zejména elektrickou energii z obnovitelných zdrojů. Výhodami alkalické elektrolýzy je její dlouholeté průmyslové využití a možnost jejího provozu bez použití platinových kovů, které jsou nezbytné v případě kyselé elektrolýzy vody. Alkalická elektrolýza vody je však ve srovnání s parním reformingem, který je průmyslově nejpoužívanější technologií výroby vodíku, ekonomicky nekonkurenceschopná. Z tohoto důvodu je třeba nalézt vhodný katalyzátor, který by celý proces zefektivnil.

Cílem této práce je charakterizovat a porovnat nově připravené materiály založené na smíšených oxidech spinelového typu a obsahující neplatinové kovy s ohledem na jejich využití jako katalyzátorů pro vývoj kyslíku. Charakterizace a porovnání testovaných materiálů bylo prováděno metodou tenkého filmu na rotační diskové elektrodě.

Sekce : Anorganická technologie

TiO₂ jako nosič katalyzátoru pro PEM elektrolýzu vody

Autor: Jan Vít
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Vodíkové hospodářství je součástí budoucí energetické koncepce bez fosilních paliv. Hlavní prioritou je řešení strategických zdrojů vodíku. Jednou z cest je výroba vodíku pomocí membránové kyselé elektrolýzy vody.

Hlavní část elektrolýzérů pro kyselou PEM elektrolýzu vody tvoří soubor dvou plynově difuzních elektrod a protonově vodivé membrány. Ta odděluje komory elektrolýzérů, kde rozkladem demineralizované vody vzniká na katodě vodík a na anodě kyslík.

Anoda se skládá z vlastní katalytické vrstvy obsahující oxidy iridia a plynově difuzní vrstvy. Kvůli oxidačnímu prostředí je nutné použití speciálních materiálů, např. tantalu či titanu. Vyšší stupeň využití katalyzátoru můžeme dosáhnout přítomností nosiče příhodných fyzikálně chemických vlastností.

Tato práce se soustředí na porovnání aktivity, vlastností a výkonu mezi katalyzátorem tvořeným čistým IrO₂ a katalyzátorem na bázi IrO₂ s TiO₂ nosičem. Data o teoretické aktivitě získaná z měření na rotační diskové elektrodě byla porovnána s provozními výkony v laboratorním elektrolýzérů.

Sekce : Kovové materiály I.

Porovnání korozní odolnosti teplosměnných trubek z korozivzdorné oceli po alternativních úpravách povrchu

Autor: Bc. Branislav Domko
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

V práci byl studován vliv alternativních povrchových úprav na odolnost austenitické korozivzdorné oceli Cr18Ni10Ti proti lokalizované korozi. Trubky vyrobené z tohoto materiálu jsou mimo jiné používány v tepelných výměnících v energetice.

Díky schopnosti vytváření pasivní vrstvy na povrchu oceli je využívána její dobrá korozní odolnost. V prostředích obsahujících agresivní ionty, zejména chloridové, u ní ale hrozí zvýšené nebezpečí lokalizovaného napadení. Na odolnost vůči lokalizovanému napadení má výrazný vliv stav povrchu materiálu. Byly sledovány následující povrchové úpravy oceli: moření, broušení, tryskání, oxidace při 200 °C, oxidace při 600 °C.

Vzorky po provedených povrchových úpravách byly podrobeny elektrochemické a expoziční zkoušce. Elektrochemickou zkouškou byly vyhodnoceny hodnoty průrazového potenciálu. Při expozičních zkouškách byla korozní odolnost odvozována z hodnoty střední rychlosti bodové koroze, která byla přepočtena z hmotnostních úbytků vzorků.

Sekce : Kovové materiály I.

Povrchové úpravy intermetalika FeAl

Autor: Bc. Vladimír Filip
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Intermetalika na bázi Fe-Al jsou perspektivní materiály pro vysokoteplotní aplikace. Vyznačují se nízkou hustotou, dobrou odolností proti tečení a výbornou odolností v oxidačních i sulfidačních atmosférách za vysokých teplot. Oproti stávajícím materiálům na bázi legovaných ocelí a niklových slitin mají také řadu nedostatků, jako například nízká houževnatost za normálních teplot, špatná odolnost proti korozi ve vodných roztocích, případně nedostatečná odolnost proti opotřebení. Některé z těchto nedostatků by mohly vyřešit vhodné povrchové úpravy. Tato práce byla zaměřena na tepelné zpracování slitin Fe-Al a Fe-Al-Si boridováním, křemíkováním a kombinací niklování a difúzního žíhání. Cílem je zlepšení odolnosti proti opotřebení (boridování, křemíkování) a korozní odolnosti (křemíkování, kombinace niklování a difúzního žíhání)

Sekce : Kovové materiály I.

Získávání zinku z odpadů po zpracování ocelářenských úletů

Autor: Josef Horčíčka
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Cílem práce bylo získat kovový Zn či sloučeninu Zn z úletů obsahujících 17,8 % Zn, které jsou produktem přepracování ocelářenských úletů v kuplovně. Úlety byly louženy v H_2SO_4 za různých podmínek. Z těchto experimentů vyplynuly vhodné loužicí podmínky vedoucí k extrakci maximálního množství Zn. Železo přešlé do výluhu bylo odstraněno hydrolytickou rafinací do $\text{pH} = 4$ až 4,5 přidáváním úletů. Zinek byl z roztoku získán elektrolyticky, vyzkoušeno bylo rovněž vysrážení zásaditého ZnCO_3 . Zatímco elektrolytický Zn měl vysokou čistotu, zásaditý ZnCO_3 byl nepatrně znečištěn Mn.

Sekce : Kovové materiály I.

Mechanismus vzniku intermetalik v systému Fe-Al

Autor: Bc. Ivo Marek

Ročník: M2

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D., Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Prášková metalurgie využívající reaktivní sintraci směsi elementárních prášků je perspektivní technologií výroby intermetalik. V případě aluminidů železa a titanu jsou však touto metodou získány velmi porézní produkty. Do současné doby bylo publikováno několik mechanismů, které se snaží tuto problematiku objasnit. Většina z těchto publikací zmiňuje přechodný vznik fází s vysokým obsahem hliníku (Fe_2Al_5 , FeAl_2 , FeAl_3), neshodují se však v typu vznikajících fází, podmínkách jejich vzniku, ani jejich vlivu na výslednou strukturu a pórovitost produktu. Cílem této práce byl popis mechanismu vzniku intermetalických fází v systému Fe-Al. U vzorku slisovaných prášků železa a hliníku byla provedena in situ RTG difrakce (Hasylab, DESY Hamburg) v průběhu reaktivní sintrace za účelem zjištění probíhajících procesů. Rovněž byla pozorována mikrostruktura produktů. Bylo zjištěno, že vznik intermetalických fází v daném systému je iniciován natavením hliníku. Přednostně vzniká fáze Fe_2Al_5 bezprostředně následovaná vznikem FeAl. Vysoká pórovitost pravděpodobně souvisí se vznikem fází ihned po natavení hliníku, čímž nedojde k vyplnění pórů taveninou, a dále pak se směrem růstu intermetalických fází.

Sekce : Kovové materiály I.

Vodíková křehkost tantalu a povlaků z tantalu

Autor: Bc. Michal Martínek

Ročník: M2

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

V současnosti jsou vyvíjeny nové elektrolyzéry vody, jejichž náplní má být horká koncentrovaná kyselina fosforečná. Je obtížné nalézt vhodný konstrukční materiál odolávající tomuto prostředí. Ze zkoušených materiálů nejlépe odolával tantal. Ale i malá katodická polarizace může způsobit jeho zkřehnutí. Cílem této práce bylo popsat vodíkové zkřehnutí tantalu v závislosti na teplotě a intenzitě katodické polarizace v kyselině fosforečné a vliv zkřehnutí na ochranné vlastnosti tantalového povlaku na korozivzdorné oceli.

Sekce : Kovové materiály I.

Příprava slitiny NiTi technologií práškové metalurgie

Autor: Bc. Lucie Mejzlíková
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Díky svým specifickým vlastnostem patří v současnosti slitina NiTi k nejvýznamnějším a nejpoužívanějším materiálům ze skupiny slitin s tvarovou pamětí. Jejich výroba je obtížná z důvodu vysoké reaktivity titanu. Nejčastěji se ke komerční výrobě těchto slitin používá vakuové indukční tavení a obloukové tavení ve vakuu. V této práci byl testován alternativní postup výroby tohoto materiálu spočívající v reakci práškového niklu a titanu za vysokých teplot, tzv. reaktivní sintrací. Bylo provedeno metalografické vyhodnocení mikrostruktury a pórovitosti v závislosti na podmínkách přípravy. Výsledky naznačují, že kromě intermetalické fáze NiTi vzniká vždy i fáze Ti_2Ni . S rostající teplotou procesu reaktivní sintrace se snižuje pórovitost těchto slitin.

Sekce : Kovové materiály I.

Chemické leštění slitin hliníku

Autor: Bc. Šárka Neumannová
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Tato práce se zabývala testováním komerční lázně na leštění hliníku a především hliníkových slitin. K experimentům byly použity vzorky tvářených hliníkových slitin různého složení, vzorky čistého hliníku a litých slitin Al – Si s různým obsahem křemíku. Při leštění duralového plechu byla zjišťována závislost na podmínkách leštění (době leštění a teplotě lázně). Experimenty s ostatními slitinami probíhaly při podmínkách doporučených výrobcem lázně (95 °C, 4 min). V případě duralů byla testována modifikace lázně přídavkem HNO_3 nebo Chelatonu III. Po vyleštění vzorků byla měřena drsnost povrchu leštěných materiálů. Bylo zjištěno, že testovaná lázeň je použitelná pro leštění tvářených hliníkových slitin s výjimkou duralů. V případě duralů se může dosáhnout zlepšení účinnosti procesu následným očištěním povrchu od korozních produktů. Slitiny Al-Si je možné v této lázni zpracovávat za dosažení matného vzhledu, pokud je lázeň obohacena o fluorid sodný.

Sekce : Kovové materiály I.

Příprava silicidů titanu práškovou metalurgií

Autor: Jaroslav Partyka
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Silicidy jsou perspektivní materiály vykazující vynikající odolnost proti tečení, vysokou odolnost proti oxidaci a rovněž vysoké teploty tání dosahující až přes 2000 °C. Z toho důvodu je příprava těchto slitin tavnými procesy obtížně proveditelná. Jako alternativní technologie se používá prášková metalurgie. Klasická technologie práškové metalurgie se skládá z výroby prášku, lisování a slinování (sintrace). Zvláštním případem sintrace je reaktivní sintrace, kdy se dochází ke vzniku požadovaných sloučenin, v tomto případě silicidů, tepelně aktivovanými a obvykle exotermickými reakcemi. V této práci se touto metodou podařilo připravit silicidy titanu (Ti_3Si , Ti_5Si_3 , Ti_5Si_4 , TiSi , TiSi_2), i když se dané silicidy vyskytovaly ve směsi silicidů spolu s nezreagovaným křemíkem a titanem. Nejtvrdší ze vzorků byl vzorek TiSi_2 , který obsahoval velké množství Ti_5Si_3 . Teplota 700 °C je pro proběhnutí reaktivní sintrace nedostatečná, nejvíce zreagoval vzorek při 1100 °C ve vakuu. Pórovitost všech vzorků byla nepřijatelná, pro praktické použití lépe použít reaktivní sintraci za zvýšeného tlaku, například pomocí izostatického slisování za tepla.

Sekce : Kovové materiály I.

Korozní rychlost katodicky „chráněné“ oceli v prostředí uhličitánů

Autor: Bc. Kateřina Wienerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Katodická polarizace je jedním ze způsobů ochrany oceli v půdě. Vlivem katodické reakce dochází k tvorbě OH^- iontů. Alkalizace půdy pak vede k pasivaci oceli v případě, že je pasivační potenciál zápornější než vložený ochranný potenciál. Cílem práce bylo určit pasivační potenciál a rychlost anodické reakce v prostředí uhličitánu o různém pH.

Měření byla prováděna pomocí potenciostatické polarizace dvouelektrody (po dobu 40 minut) a odporové sondy (po dobu 3 dnů) v prostředí uhličitánu o pH 9 až 13. Bylo zjištěno, že výsledky získané oběma metodami jsou v dobré shodě. Rychlost anodické reakce v aktivním i pasivním stavu klesá se zvyšující se dobou expozice. Při pH 12 a vyšším ocel přechází do pasivity při běžném ochranném potenciálu -730 mV/ACLE (- 850 mV/CSE), při pH nižším ocel koroduje v aktivitě. Při nedostatečné alkalizaci tak může ocel při běžném ochranném potenciálu korodovat v půdě nepřijatelnou korozní rychlostí.

Sekce : Kovové materiály II.

Kvantifikace strukturních změn v chrom-vanadové ledeburitické oceli v závislosti na teplotě austenitizace

Autor: Ing. Pavel Bílek

Ročník: M2

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jana Sobotová, Ph.D., doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D

Práce je zaměřena na zhodnocení vlivu teploty austenitizace na strukturní změny v Cr-V ledeburitické nástrojové oceli vyráběné práškovou metalurgií. Vzorky oceli Vanadis 6 byly austenitizovány při teplotách v rozsahu 1000 – 1200 °C a poté byly kaleny do oleje o pokojové teplotě. Strukturní změny byly pozorovány pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu. K hodnocení struktury byly použity software NIS Elements a manuální postupy. Získané výsledky popisují intenzivní rozpouštění karbidů typu M_7C_3 v austenitu. Tyto nebyly nad teplotou 1100°C již dále detekovány. Na druhé straně, karbidy typu MC zůstávají téměř neovlivněny a symptomy jejich rozpouštění byly objeveny pouze při teplotě austenitizace 1200°C. Sycení austenitu uhlíkem a legujícími prvky vede ke zvýšení tvrdosti zakaleného materiálu. Maximum tvrdosti bylo zjištěno při teplotě austenitizace 1025°C. Rostoucí teplota austenitizace vede ke zvyšování množství zbytkového austenitu a ke snižování pevnosti v tříbodovém ohybu.

Sekce : Kovové materiály II.

Vlastnosti slitin NiTi s tvarovou pamětí pro medicínu

Autor: Zdeněk Fulín

Ročník: M1

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Nitinol, přibližně ekvimolární slitina niklu a titanu, se vyznačuje zvláštními mechanickými vlastnostmi. Jedná se o vysokou pevnost, superelasticitu, pseudoplasticitu a tvarovou paměť. K dalším výhodným vlastnostem patří dobrá korozní odolnost a poměrně dobrá biokompatibilita. Díky nim je nitinol využíván v celé řadě medicínských aplikací, hlavně pro výrobu implantátů, například svorek pro fixaci zlomenin, stentů, rovnátek, atd.

Požadované vlastnosti materiálu závisí do velké míry na jeho zpracování. Cílem této práce proto bylo nalézt nejvhodnější postupy finálního tepelného a chemického zpracování slitiny NiTi pro výrobu implantátů.

V této práci byl sledován vliv vybraných postupů zpracování na morfologii povrchu a únavovou životnost materiálu. Také byly zaznamenávány úbytky materiálu během zpracování.

Výsledky měření ukazují výrazný vliv teploty tepelného zpracování na jeho únavovou životnost. Dále byl pozorován vliv složení atmosféry při tepelném zpracování a vliv následného chemického zpracování na stav povrchu materiálu. Tyto faktory mění i únavové chování slitiny, ale v mnohem menší míře než teplota tepelného zpracování.

Sekce : Kovové materiály II.

Štěrbínová koroze alternativních materiálů pro výztuže betonu v modelovém pórovém roztoku

Autor: Adrian Gonda
Ročník: B3
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoužil, Ph.D.

V práci byla studována náchylnost ke štěrbinové korozi korozivzdorných ocelí pro výztuže betonu. Jednalo se o oceli FeCr17 (EN 1.4016); FeCr18Ni10 (EN 1.4306); FeCr18Ni10Mo2 (EN 1.4404) a FeCr21Mn4Ni1N (EN 1.4162). Oceli byly sledovány ve dvou stavech povrchu – broušený a zokujený. Prostředím byl modelový pórový roztok zkarbonatovaného betonu: nasycený roztok uhlíčitanu vápenatého (pH 8,1) s obsahem chloridů 100 g.dm^{-3} (byl použit NaCl). Pro hodnocení byly použity metody gravimetrická a měření elektrochemického šumu. Moderní materiál FeCr21Mn4Ni1N, který má zlepšené mechanické vlastnosti, odpovídá svým korozním chováním spíše materiálu FeCr18Ni10 než oceli se zvýšeným obsahem molybdenu FeCr18Ni10Mo2.

Sekce : Kovové materiály II.

Vlastnosti hořčíkových slitin pro biodegradovatelné lékařské implantáty

Autor: Daniela Hofmanová
Ročník: B3
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Hořčík je kov pro lidský organismus netoxický, proto se v současnosti uvažuje o jeho využití pro výrobu biodegradovatelných lékařských implantátů. Biodegradovatelný implantát, např. šroubní fixace zlomené kosti, by se v organismu po určité době samovolně rozložil za tvorby netoxických produktů. Hlavní překážkou je však vysoká korozní rychlost hořčíku a jeho slitin. Legováním vhodnými prvky je však možné dosáhnout nejen zvýšené korozní odolnosti, ale zároveň vhodných mechanických vlastností. Cílem této práce je hodnocení mechanických a korozních vlastností vybraných hořčíkových slitin. Získaná data by měla přispět k vývoji vhodných slitinových systémů využitelných pro přípravu biodegradovatelných implantátů.

Sekce : Kovové materiály II.

Korozní vlastnosti slitin hořčíku s kovy vzácných zemin

Autor: Bc. Jan Kaňok
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Biomateriály na bázi hořčíku představují zajímavou alternativu pro použití jako degradovatelný materiál chirurgických implantátů. Jednou z možností zvýšení korozní odolnosti hořčíku v tělním prostředí je legování kovy vzácných zemin, které modifikují povrchovou oxidickou/hydratovanou oxidickou vrstvu. Vzhledem k použití v medicíně je rovněž značně relevantním údajem rychlost, s jakou dochází k uvolňování vodíku jako produktu katodické reakce. Práce byla zaměřena na zhodnocení korozních vlastností slitin hořčíku s kovy vzácných zemin. Záměrem bylo metodou elektrochemické impedanční spektroskopie dokumentovat vznik a vývoj vrstevnaté struktury vytvářející se na povrchu během expozice. Na vzorcích byla po dobu 24 h kontinuálně zaznamenávána impedanční spektra (potenciostat Gamry PCI4). Zároveň byly pro každý vzorek stanoveny objemovou metodou hodnoty rychlosti uvolňování H_2 a vypočteny korozní rychlosti. Expozice trvala 24 hodin, snímán byl na počátku a na konci měření po dobu 4 - 5ti hodin objem uvolněného vodíku. Měření byla ve všech případech realizována v provzdušněném statickém fyziologickém roztoku (NaCl 9 g/l) o teplotě 37 °C. Přítomnost vrstevnaté struktury se v impedančních spektrech projevila pouze u 2 ze 17 vzorků, rychlost uvolňování vodíku s dobou expozice a v závislosti na typu vzorku jak rostla, tak klesala.

Sekce : Kovové materiály II.

Chemické zpracování povrchu slitiny NiTi a jeho vliv na vlastnosti materiálu

Autor: Vojtěch Kučera
Ročník: B2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Přibližně ekvimolární slitina niklu a titanu, nazývaná nitinol, je díky svým unikátním vlastnostem (superelastická, pseudoplasticita, tvarová paměť a dobrá korozní odolnost) používána v medicíně na výrobu implantátů – např. rovnátek, stentů, atd.

Při výrobě stentů se jako závěrečný proces provádí tzv. „shape setting“, při kterém je stent namotaný na trnu tepelně zpracováván, čímž se dosahuje požadovaných mechanických vlastností výrobku. Při tomto výrobním kroku vzniká na povrchu několik desítek nanometrů silná oxidická vrstva bohatá na titan. Tato vrstva však obsahuje velké množství defektů, které mohou vést k lokalizovaným formám koroze. Proto je vyvíjena snaha tuto vrstvu odstranit a vytvořit novou, bezdefektní vrstvu bohatou na oxid titaničitý, která brání uvolňování nikelnatých iontů do těla a výrazně tak zvyšuje biokompatibilitu i životnost implantátu.

Cílem této práce bylo navrhnout postup chemického zpracování a sledovat jeho vliv na morfologii povrchu, mechanické a únavové vlastnosti materiálu.

Sekce : Kovové materiály II.

Koroze zinkované oceli v prostředí betonu

Autor: Bc. Tomáš Lískovec
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Použití zinkované oceli jako výztuže do betonu je ekonomicky přijatelná alternativa běžné oceli v prostředí s vyššími nároky na korozní odolnost. Kvůli korozi zinkované výztuže v betonu existuje řada otázek týkajících se vývoje vodíku při korozi zinkového povlaku v čerstvém betonu a jeho vlivu na výslednou soudržnost výztuže s betonem. Pro objasnění tohoto jevu byly v této práci provedeny elektrochemické korozní zkoušky v kombinaci s optickou emisní spektroskopií v doutnavém výboji, ze které byly získány informace o stavu zinkových povlaků po expozici. Pomocí těchto metod bylo vysvětleno korozní chování Zn povlaku. Pro objasnění vlivu koroze povlaku na soudržnost byly provedeny vytlačovací a vytahovací zkoušky, tyto jednoznačně prokázaly zhoršení soudržnosti zinkované výztuže oproti běžné oceli o cca 20-30%. Příčinou tohoto zhoršení je koroze zinku v aktivitě spojená s vývojem vodíku, kterou je potřeba eliminovat například použitím konverzního povlaku na bázi Cr^{VI} nebo povlaku o složení mezifáze Zn-Fe, která způsobuje pasivaci Zn povlaku.

Sekce : Kovové materiály II.

Nanostrukturování slitin titanu

Autor: Hynek Moravec
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska CSc.

Předmětem práce bylo připravit metodou elektrochemické oxidace nanostrukturované povrchy na β -slitině titanu legovaného Nb a Ta ($\text{Ti}_{39}\text{Nb}_{6}\text{Ta}$, Ti_{39}Nb). V současnosti je vývoj v oblasti implantátů zaměřen na tento materiál z důvodu příznivějších mechanických vlastností i biotolerance.

Na základě dat dostupných z literatury byla provedena orientační měření, na jejichž základě byly zvoleny podmínky pro systematické studium tvorby nanostruktury. Zvoleným prostředím byla kyselina fosforečná s fluoridem sodným, byl sledován vliv koncentrace fluoridových iontů a hodnoty expozičního potenciálu. Za podmínek, které vedly ke vzniku akceptovatelné nanostruktury, byla provedena měření na binární slitině Ti_{39}Nb . Stav povrchů vzorků po expozici byl dokumentován rastrovacím elektronovým mikroskopem. Zároveň byl v průběhu prací testován grafický algoritmus pro kvantifikaci rozměrových parametrů vzniklých nanotrubiček.

Kombinací experimentálních podmínek bylo dosaženo žádoucích povrchových úprav v podobě nanotrubiček různé morfologie.

Sekce : Kovové materiály II.

Studium přilnavosti Ag vrstev vytvořených metodou Cold Spray k vybraným substrátům

Autor: Bc. Milena Voděrová
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc.Dr.Ing. Dalibor Vojtěch

Cold Spray (CGDS) je inovativní metoda vytváření kovových vrstev, která spočívá v akceleraci kovu ve formě prášku nad hodnotu rychlosti zvuku a v zajištění dostatečné plastické deformace vedoucí ke spojení částic při dopadu na substrát. Takto vzniklé vrstvy se vyznačují výrazně lepšími vlastnostmi (malá velikost zrna, nižší pórovitost, vyšší pevnost) než vrstvy vytvořené konvenčními způsoby, např. klasickým termickým nástřikem. Tato metoda se jeví jako perspektivní z hlediska výroby naprašovacích targetů používaných ve sklářském průmyslu na výrobu tenkých vrstev na skle pomocí magnetronového naprašování.

Jedním z problémů, které mohou při výrobním procesu nastat, je nedostatečná přilnavost kovové (stříbrné) vrstvy k substrátu vlivem zvýšeného vnitřního pnutí. Cílem práce je analyzovat vrstvy připravené na rozdílných substrátech a určit vhodnou kombinaci substrát- povrchová úprava, aby stříbrná vrstva dostatečně přilnula k substrátu bez vzniku vnitřního pnutí.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Fotokatalytická aktivita vrstev TiO₂ připravených na optických vláknech

Autor: Bc. Ivo Bartoň
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Josef Matoušek DrSc.; školitel spec: Ing.Vlastimil Matějec, CSc.

Práce se zabývá přípravou a charakterizací vrstev oxidu titaničitého, ve formě nanočástic anatasu, které jsou naneseny na optické vlákno a mají fotokatalytické vlastnosti. Optické vlákno slouží jako substrát fotokatalytické vrstvy a umožňuje přívod UV světla k vrstvě. Taková vlákna lze pak využít pro fotokatalytické rozklady látek v nepřístupných místech nebo v reaktorech. V této práci byly na mikroskopických sklech a optických vláknech připraveny vrstvy TiO₂-anatasu alkoxidickou metodou sol-gel a zachycením v polymerní matrici. V metodě sol-gel byly použity soly připravené z alkoxidů a rovněž soly nanočástic anatasu ve vodě (Degussa P25, Aldrich). Polymerní matrice byla připravena z UV tvrditelného DMS-Desolite s nanočásticemi Degussa P25. Alkoxidické soly byly na skla a optická vlákna nanášeny metodou namáčení (dip-coating) a tepelně zpracovány při 420 °C. Vrstvy ze solů nanočástic ve vodě byly sušeny při 70 °C, vrstvy polymerů byly UV tvrzeny. Vrstvy byly charakterizovány pomocí optické a rastrovací elektronové mikroskopie, RTG difrakce a profilometrie. Fotokatalytická aktivita vrstev byla testována pomocí sledování kinetiky rozkladu roztoku methylenové modři. Největší aktivitu měla vrstva připravená z vodného solu nanočástic Degussa P25 a to jak na mikroskopických sklech tak optických vláknech.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Adheze povlaků na kovových substrátech pro medicínské aplikace

Autor: Tereza Běloubková

Ročník: M1

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Diana Horkavcová Ph.D., Konzultant: Dr. Ing. Dana Rohanová

Kovové biomateriály se v těle chovají jako inertní materiály, proto se upravuje jejich povrch bioaktivní vrstvou, např. metodou sol-gel. U vrstev je možné zkoumat jejich adhezi k substrátu metodami, jako *tape test* nebo *scratch test*. Připraveny byly tři typy křemičitých vrstev s přídavkem stříbra (základní křemičitá vrstva, křemičitá vrstva s brushitovým práškem a křemičitá vrstva s monetitovým práškem) na titan. Vrstvy byly nanášeny na očištěné titanové destičky metodou sol-gel technikou *dip-coating*, usušeny, vypáleny při 500 °C/1hod. a louhovány v 10 mol.l⁻¹ NaOH/4hod. Povrch vzorků byl zkoumán v rastrovacím elektronovém mikroskopu (SEM) i pomocí optického mikroskopu (OM). Na vzorcích bylo provedeno měření adheze vrstev k substrátu metodou *tape test* (vrypy ve tvaru mřížky) a metodou *scratch test* (vryp o délce 1,5 cm). *Scratch test* byl proveden na přístroji CSEM Revetest s použitím diamantových indentorů Rockwellova typu s poloměrem zakřivení 0,2 mm a 0,5 mm při rozsahu normálové síly 0-80 N. Adheze při *tape testu* byla velmi dobrá u všech tří vrstev. Při *scratch testu* s indentorem 0,2 mm došlo k velkému porušení vrstvy od malého zatížení u všech tří typů. Pro indentor 0,5 mm bylo nejmenší sedření u vrstvy s monetitovým práškem a největší u vrstvy s brushitovým práškem.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Interakce scaffoldu připraveného ze skla Bioglass s roztokem DMEM

Autor: Pavlína Bozděchová

Ročník: M1

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D., Konzultant: Dr. Ing. Dana Rohanová

Scaffoldy (výztuže) patří mezi biomateriály, které poškozenou tkáň nahradí, a zároveň ji regenerují. Jejich vysoce porézní struktura zajišťuje vrůstání tkáně do pórů, čímž dochází k tvorbě pevné vazby s hostitelskou tkání. Sklokeramické *scaffoldy* použity v této práci byly připraveny na Imperial College London z bioaktivního skla 45S5 Bioglass® tzv. replikační metodou. Sklokeramický *scaffold* obsahuje hlavní krystalickou fázi (combeite - Na₂O.2CaO.3SiO₂, 77%) a zbytkovou skelnou fázi (asi 23%). V experimentální části práce byla po dobu 15 dní sledována interakce *scaffoldů* se simulovanou tělní tekutinou DMEM (Dulbecco's modified Eagle's medium), při staticko-dynamickém uspořádání *in vitro* testu (každých 24 hodin byl *scaffold* ponořen do čerstvého směsného DMEM roztoku). Experiment probíhal ve sterilním prostředí. Nově vytvořené fáze na površích *scaffoldů* i analýzy výluhů DMEM ukázaly, že *in vitro* test nevedl k tvorbě krystalické fáze hydroxyapatitu (HAp), ale amorfní Ca-P fáze, CaCO₃ a NaCl (potvrzeno metodou SEM/EDS i RTG difrakcí). Z analýz výluhů a ze změn hmotností bylo zjištěno, že rychlost rozpouštění sklokeramického *scaffoldu*, byla vyšší oproti rychlosti tvorby nových fází na povrchu materiálu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Možnosti charakterizace bioaktivních vrstev připravených tzv. prekalcifikací

Autor: Bc. Pavla Kolaříková
Ročník: M1
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.

Pro zlepšení fixace implantátů v živém organismu se využívá řada metod, kterými je možno na povrchu inertního materiálů vytvořit tenkou bioaktivní vrstvu. Předmětem studie bylo popsat možnosti různých analytických metod pro hodnocení povrchu bioaktivních vrstev připravených na titanovém substrátu metodou prekalcifikace.

Základní úprava vzorků byla provedena firmou Lasak s.r.o.. Vzorky po této úpravě vykazovaly značnou změnu struktury povrchu oproti povrchům původních vzorků, což bylo zjištěno metodou měření drsnosti povrchů a dále byly označeny na základě měření kontaktního úhlu jako superhydrofilní. Vzorky byly dále vystaveny působení prekalcifikačního roztoku SCS (Supersaturated Calcification Solution), za účelem obohacení jejich povrchu o vápenaté a fosforečnanové ionty. Prekalcifikované vzorky byly dále testovány na jejich bioaktivitu pomocí dynamického in vitro testu v roztoku SBF (Simulated Body Fluid).

Morfologie vzniklých vrstev byla pozorována po každé úpravě/testu vzorku pomocí optického a elektronového mikroskopu. Přítomné fáze byly charakterizovány pomocí XRD analýzy a jako vhodná doplňující metoda byla zvolena metoda FTIR. Jako diskutabilní lze označit výsledky měření metodou GDS.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Sledování interakce slinutého hydroxyapatitu s SBF za dynamických podmínek

Autor: Lenka Kuncová
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D., Konzultant: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Hydroxyapatit ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$), HA) je anorganická látka přirozeně se vyskytující v kostní a zubní tkáni. Proto je výhodné ho uměle připravovat pro medicínské aplikace, především jako výplň, rozpěru, či kostní štěp v ortopedii a stomatologii. Hydroxyapatitový implantát je bioaktivní látka, která vytváří s hostitelskou tkání přímou chemickou vazbu. Studie byla provedena za účelem simulovat chování biomateriálu v živém organismu. Studoval se syntetický, slinutý hydroxyapatit (BAS® - HA) vyrobený firmou Lasak spol. s.r.o. Napodobení prostředí uvnitř organismu bylo dosaženo dynamickým uspořádáním experimentu s kontinuálním průtokem simulované tělní tekutiny (SBF), zajištěným peristaltickým čerpadlem. Průtočné cely byly naplněny hydroxyapatitem do 1/4 jejich objemu, umístěny do termostatu vytemperovaného na 37°C a napojeny na zdroj (SBF). Během dlouhodobé expozice (56 dnů) byl povrch materiálu sledován optickým i skenovacím elektronovým mikroskopem, bylo využito i RTG difrakční analýzy a metody BET. Výluhy roztoku SBF byly analyzovány atomovým absorpčním spektrometrem a spektrofotometrem. Na povrchu biomateriálu došlo interakcí s roztokem SBF k vytvoření požadované hydroxyapatitové fáze (HAP) a nárůstu hmotnosti o 3,45%.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava vrstev na titanových substrátech metodou sol-gel

Autor: Zuzana Mizerová

Ročník: M1

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Diana Horkavcová PhD., Konzultant: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Titan i titanové slitiny se v lidském organismu chovají téměř inertně, proto je nutné jejich povrch upravit bioaktivní vrstvou. Pomocí metody sol-gel je možné připravit tenkou bioaktivní vrstvu i na téměř bioinertním substrátu.

Byly provedené dva samostatné experimenty. První experiment se prováděl s křemičito-vápenato-fosforečnanovým solem (Si-Ca-P). Při druhém experimentu byl substrát potažen křemičito-titaničito-vápenato-fosforečnanovým solem (Si-Ti-Ca-P). Mechanicky a chemicky předupravené vzorky byly metodou *dip-coating* potaženy připravenými soly s různými dobami odležení a vypáleny na 400 nebo 500 °C (Si-Ca-P) resp. na 400 °C (Si-Ti-Ca-P). Povrch vzorků byl hodnocen pomocí OM, SEM a EDS analýzy. Adhezivní vlastnosti vrstev byly ověřeny pomocí *tape* testu (dle ASTM D 3359) a u obou vrstev byly hodnoceny jako velmi dobré. Bioaktivita povlaků byla testována za statických podmínek v roztoku SBF (Simulated Body Fluid). V případě vrstvy Si-Ti-Ca-P došlo na celé ploše povrchů k tvorbě drobných seskupení krystalů fosforečnanů vápenatých, naznačujících její bioaktivitu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava bioaktivní vrstvy na povrchu stabilizovaného ZrO₂

Autor: Bc. Alžběta Nežiková

Ročník: M1

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Stabilizovaný ZrO₂ je vysoce inertní materiál a využívá se pro implantáty kolenních kloubů. Díky výborným mechanickým vlastnostem a bílé barvě se uvažuje o jeho uplatnění v dentální implantologii. Část implantátu se musí ukotvit v čelisti a vytvořit s kostí pevnou vazbu. Proto je nutné na této části vytvořit bioaktivní povrch. Vzorek ZrO₂ byl pro zvětšení reakční plochy povrchu otryskán částicemi Al₂O₃ (firmou LASAK) a chemicky aktivován kyselými (HF) nebo zásaditými roztoky (NaOH). Z následné prekalifikace v roztoku SCS2 (Supersaturated Calcification Solution) bylo patrné, že fosforečnany vápenaté (Ca-P) se tvoří na površích leptaných jak kyselinou HF, tak roztokem NaOH. Fosforečnany vápenaté se v prostředí tělní tekutiny rozpouštějí a zvyšují v okolí implantátu koncentraci iontů Ca²⁺ a PO₄³⁻ potřebných pro precipitaci hydroxyapatitu z tělních tekutin. Z výsledků SEM/EDS a RTG mikrodifrakce vyplynulo, že nejlepším médiem pro aktivaci povrchu před prekalifikací byl roztok NaOH. Zásadité prostředí je totiž ideální pro vznik fosforečnanů vápenatých apatitového typu. Bioaktivita připravených vrstev byla následně ověřována *in vitro* testem v simulované tělní tekutině (SBF) za statických podmínek.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava a charakterizace ochranných sol-gel vrstev

Autor: Martina Urbanová

Ročník: M2

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D., Konzultant: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Ve farmaceutickém průmyslu jsou na obalové sklo kladeny velké nároky. Vytvořením tenké ochranné vrstvy na povrchu lahvičky je možno zabránit vyluhování složek skla do léčiva. Oxid zirkoničitý se běžně přidává přímo do sklářského kmene kvůli zvýšení odolnosti skla. Ještě větší odolnosti je ale dosaženo přímým potažením substrátu zirkoničitou vrstvou, která má kromě ochranné funkce i výborné optické vlastnosti. Jedním z nenáročných, ale velmi efektivních způsobů tvorby tenké vrstvy je metoda sol-gel. Skleněné a kovové substráty byly potaženy jak v čistém zirkoničitém solu, tak ve směsném zirkoničito-křemičitém solu. Zdrojem Zr a Si byl zirkonium tetrapropoxid (Zr(OPr)_4 , ZTP) a tetraethoxysilan (Si(OEt)_4 , TEOS). Soly byly připraveny z acetylacetonu, tritonu, ethanolu a vody. Po 24-hodinovém míchání následovalo potahování předupravených substrátů metodou *dip-coating*. Po vysušení a vypálení vzorků byl jejich povrch hodnocen optickým a elektronovým mikroskopem, byla hodnocena adheze vrstev metodou *tape test*, změna vlastností po 24 hodinovém vyluhování ve vodě. U skleněných substrátů byla také spektrofotometricky měřena propustnost světla.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava bioaktivních vrstev s antibakteriálními účinky metodou sol-gel

Autor: Zdeněk Zmeškal

Ročník: M1

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D., Konzultant: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Biomateriály jsou široká skupina materiálů, které mohou být implantovány do živého organismu za účelem nápravy nebo náhrady jeho poškozených částí. Jejich užité vlastnosti mohou být zvýšeny pomocí nanesených funkčních vrstev. Cílem této práce bylo vytvoření povrchové vrstvy s baktericidními účinky. Jako substrát byly použity titanové destičky, které byly nejdříve mechanicky a chemicky opracovány. Vzorky byly potaženy titaničitým solem metodou sol-gel, technikou *dip-coating*. Jako příměs bylo použito koloidní stříbro a prášek brushitu nebo monetitu. Potažené vzorky byly vypalovány při 400 °C po dobu 2 nebo 6 hodin. Vzorky byly podrobeny testu adheze pomocí *tape-testu* (ASTM D 3359). Po výpalu a *tape-testu* byly vzorky zkoumány elektronovým a optickým mikroskopem. Test antibakteriálních vlastností byl prováděn na koloniích bakterií *Escherichia coli* (*E. coli*) při laboratorní teplotě, po dobu 1 hodiny. Vrstvy po výpalu vykazovaly rovnoměrný, kompaktní povrch s drobnými mikrotrhlinami. Destičky potažené soly s příměsí brushitu nebo monetitu byly rovnoměrně pokryty částicemi. Po *tape-testu* vykazovaly výbornou adhezi. Nejlepší antibakteriální vlastnost prokázala vrstva s příměsí monetitu, vypalovaná 2 hodiny.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava neaktivních keramik pro zářiče ^{137}Cs

Autor: Le Van Anh
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Andertová Jana, Ing., Csc.

Práce se zabývá přípravou porézních keramických nosičů pro radioaktivní zářiče. Nosiče byly připraveny z plastifikované keramické směsi na bázi jílových minerálů metodou extruze. Byl studován vliv složení vstupních plastických směsí (obsah keramické báze a pórtvorného činidla) na tokové chování směsi; tj. na charakter tokové křivky stanovené metodou kapilární viskozimetrie. Ze tří typů směsí byla připravena zkušební tělesa, u nichž byly po vysokoteplotním zpracování studovány mechanické a fyzikálně-chemické vlastnosti. Na základě porovnání stanovovaných vlastností je podán návrh dalšího řešení této problematiky s cílem přípravy vzorků požadované homogenity, rozdělení velikosti pórů a mechanických vlastností.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II.

Porovnání chemické odolnosti barnatého a draselného křišťálu

Autor: Petra Dyrčíková
Ročník: M1
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká; školitel spec.: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSs.

Předložená práce se zabývá porovnáním chemické odolnosti dvou typů křišťálových skel, barnatého a draselného, s cílem rozšířit poznatky o korozi těchto skel. Modelové testy probíhaly na dřevěných i celistvých vzorcích loužením do destilované vody a alkalických vodných roztoků o $\text{pH}=11$ (NaOH , Na_2CO_3 , pufr) za zvýšené teploty. U drti byl sledován vliv doby loužení (1-48h) na rozpouštění skel při míchání a bez míchání loužících roztoků, u celistvých vzorků pak vizuální změny na povrchu skel při dlouhodobém působení těchto roztoků (1rok). Testy na dřevěných vzorcích ukázaly, že ve všech loužících roztocích dochází k výraznějšímu rozpouštění draselného křišťálu oproti barnatému křišťálu. K nejvyššímu rozpouštění drti obou typů skel docházelo z nepufrovaných alkalických roztoků do Na_2CO_3 , v tomto roztoku bylo zjištěno i vizuálně nejvýraznější poškození povrchu celistvých vzorků. Míchání roztoků zvyšovalo rozpouštění skel pouze v případě pufru, v ostatních roztocích bylo naopak rozpouštění obou typů skel při míchání nižší, než při loužení bez míchání.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Keramické skafoldy

Autor: Bc. Daniela Horáková
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: prof. RNDr. Ondřej Gedeon Ph.D.

Práce se zabývá zkoumáním biokeramických materiálů – keramických skafoldů, které je možné použít jako kostní implantáty. Cílem práce je dosáhnout u keramického skafoldu podobné chemické a fyzikální vlastnosti jaké má kostní tkáň.

Keramické skafoldy se připravovaly dvoustupňovou syntézou. Prvním krokem byla příprava čistého hydroxyapatitu acidobazickou titrací kyseliny fosforečné. Následně se připravil keramický skafold s různými pórovitými činidly (1 hm.%) při různých teplotách výpalu (400-1100 °C). Optimalizace keramického skafoldu se prováděla měřením pevnosti, pórovitosti, bioaktivity, termogravimetrií a skenovací elektronovou mikroskopií.

Změřené vlastnosti jsou závislé na teplotě výpalu skafoldů a použitém pórotvorném činidle. S rostoucí teplotou výpalu se pevnosti zvyšují, velikosti mikropórů se zmenšují vlivem slinování a makropóry jsou závislé na pórotvorném činidle. Z hlediska bioaktivity byl nejlépe hodnocen vzorek s teplotou výpalu 1100 °C a přírodním pórovitým činidlem. Nasákavost a zdánlivá pórovitost je nejlepší u vzorků s teplotou výpalu 600-800 °C.

V porovnání se všemi získanými vlastnostmi jsou nejvhodnější vzorky s teplotou výpalu 600-800 °C.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Modelování koroze křišťálových skel

Autor: Bc. Lukáš Hrbek
Ročník: M1
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

V práci byla pomocí fyzikálně-chemického modelu koroze vyhodnocena experimentální data z dřívějších studií, popisujících interakci čtyř typů Ba křišťálových skel s různými typy kyselin, s destilovanou vodou (DW) a NaOH. Zatímco korozi v kyselinách lze popsat pouze pomocí interdifúze H_3O^+ z roztoku a pohyblivých iontů ze skla v povrchové vrstvě skel, v roztocích s vyšším pH je třeba zahrnout i rozpouštění skelné sítě. Pro kyselá prostředí byly hodnoty difúzních koeficientů získány z analytického řešení Fickových zákonů za předpokladu difúze z konstantního zdroje. Pro DW a NaOH bylo použito numerické řešení (metoda sítí) II. Fickova zákona rozšířeného o představu pohyblivého rozhraní sklo-roztok. Difúzní koeficienty iontů pro kyselá prostředí jsou v porovnání s DW a NaOH mírně vyšší a klesají v řadě $\text{Na} > \text{K} > \text{Ba}$. Při korozi v NaOH a DW lze zanedbat pomalou difúzi Ba, jehož převod do roztoku lze popsat pouze pomocí rozpouštění skelné sítě. Rychlost rozpouštění skla, vypočtená s časových závislostí množství SiO_2 převedeného do roztoku, ve všech případech exponenciálně klesala s časem. Pro další zpřesnění modelu by bylo nutné je zahrnout do výpočtů možnost zpětného srážení korozních produktů a uvažovat koncentračně či časově závislé difúzní koeficienty.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Srovnání metod přípravy dentálních leucitových surovin

Autor: Hana Kamlerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Keramika patří k hlavním a také k nejstarším materiálům pro výrobu zubních náhrad. Pro dentální aplikace jsou nejrozšířenějšími keramickými materiály leucitové kompozity, které se používají jak pro přípravu celokeramických, tak i kovokeramických zubních náhrad. Jedním z cílů práce bylo porovnat produkty dvou různých metod syntéz tetragonálního leucitu včetně časové a energetické náročnosti příslušné syntézy. První metodou byla iontová výměna z analcimu, druhou - kalcinace amorfního prekursoru. Syntetizované prášky byly zhodnoceny především z hlediska chemického a fázového složení (XRF a XRD), tvaru a velikost částic (optický mikroskop, SEM) a distribuce velikosti částic a aglomerátů (laserová difrakce). Druhou fází byla příprava vzorků pro měření vybraných vlastností kompozitů připraveného oběma metodami. Vzorky ve formě vylisovaných tabletek či odlitých tyček, byly připraveny homogenizací dvou odděleně syntetizovaných složek tj. krystalické (leucitového prášku) a amorfní (skleněné frity připravené utavením oxidů v daném poměru). Na těchto vzorcích jsou následně měřeny tvrdost (H_v), Youngův modul pružnosti (E) a roztažnost (KTR). Práce bude zakončena porovnáním vlastností kompozitů připravených výše uvedenými metodami.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Optické vlastnosti mozaikových skel

Autor: Kristýna Rýcová
Ročník: B2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

V naší laboratoři bylo připraveno sklo, jež je kopií tmavě fialového historického skla z mozaiky na katedrále sv. Víta v Praze. Původní materiál je vysoce draselné sklo ze 14. stol., pravděpodobně vyrobené v Čechách. Kopie tohoto skla byla připravena pro účel budoucího restaurování mozaiky a pro potřeby testování konzervačních technik. U nově připraveného skla-kopie byly měřeny optické vlastnosti, které jsou důležité pro estetický vzhled mozaikových kamenů. Byl změřen index lomu, disperze indexu lomu a transmisní spektrum, ze kterého pak byly vypočítány barevné trichromatické souřadnice a určena barevnost skla. Byla určena poloha barevného odstínu v trichromatickém trojúhelníku XYZ a v systému Lab.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Bifunkční bioaktivní skafoldy na bázi hydroxyapatitu s hierarchickou mikrostrukturou

Autor: Bc. Dalibor Soukup
Ročník: M2
Ústav: Ústa v skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst (konzultant: MUDr. Lucie Bačáková, CSc.)

Hydroxyapatit (HAp) patří k nejlépe prozkoumaným keramickým materiálům pro lékařské aplikace, které sahají od povlaků implantátů až k přípravě osteokonduktivních struktur (skafoldů) ve tkánovém inženýrství. Zatímco výzkum v posledních dvou dekadách se soustředil na vytvoření osteokonduktivních materiálů vhodné pórovitosti a velikosti pórů, cílem aktuálního výzkumu je vytvoření bifunkčních skafoldů, které poskytují nejen vhodnou topologii pórového prostoru, ale zároveň poskytují možnost plnit osteoinduktivní funkce tím, že matrix funguje jako nosič proteinů vyvolávajících růst kostní tkáně, např. tzv. růstových faktorů. Cílem tedy musí být vytvoření hierarchické mikrostruktury. Práce vychází ze zjištění, že možnosti řízení mikrostruktury pomocí sacharidů a polysacharidů jsou mnohem širší než by se dalo soudit na základě prací dosud publikovaných v oblasti biomateriálového inženýrství. V tomto příspěvku jsou představeny výsledky přípravy porézního hydroxyapatitu s hierarchickou mikrostrukturou vzniklou kombinací částečného slinování a použití sacharózy jakožto pórotvorného činidla. Součástí příspěvku jsou studie mikrostruktury a vlastností těchto materiálů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava a charakterizace vysocehlinitých žáromaterálů se zvýšenou pórovitostí – pilotní studie

Autor: Bc. Jana Šámalová
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá přípravou keramiky na bázi kaolinu a korundu s přidavkem bramborového škrobu jako pórotvorného činidla. Ze směsí obsahujících 20 obj.% škrobu při objemových poměrech kaolinu a korundu 4:1 resp. 3:2 byly lisovány při různých tlacích (25, 50 a 100 MPa) tablety, které byly následně vypáleny při teplotách od 1100 °C do 1500 °C. Po výpalu byla stanovena jejich objemová hmotnost (1,65–1,92 g/cm³ pro 1100 °C, 2,23–2,47 g/cm³ pro 1500 °C), zdánlivá pórovitost (37,1–47,5 % pro 1100 °C, 20,3–27,6 % pro 1500 °C), zdánlivá hustota (2,98–3,28 g/cm³ pro 1100 °C, 2,91–3,21 g/cm³ pro 1500 °C) a smrštění (3,6–5,5 % pro 1100 °C, 10,4–13,3 % pro 1500 °C). Byly vyvozeny závěry o vlivu lisovacího tlaku. Další charakteristiky byly stanoveny pro tablety lisované tlakem 100 MPa. Byla využita rtuťová porozimetrie ke stanovení velikosti pórů (medián je přibližně 0,2 μm pro teplotu výpalu 1100 °C, 1 μm pro 1300 °C a 3 μm pro 1500 °C) a její výsledky následně srovnány s velikostí pórů po vyhořívání škrobu, které byly stanoveny obrazovou analýzou (přibližně 30–33 μm). Na základě výsledků rentgenografické fázové analýzy a znalosti hustot jednotlivých fází byla odhadnuta skutečná hustota pevné fáze (3,26–3,62 g/cm³) a vypočteny skutečné pórovitosti (26–47 %).

Sekce : Ánorganické nekovové materiály II

Syntéza bioaktivní keramiky

Autor: Bc.Hana Šumberová
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing.Jana Andertová CSc., prof. RNDr.Ondřej Gedeon, Ph.D..

Bioaktivní keramika na bázi hydroxyapatitu patří mezi potenciální materiály určené pro náhradu kostní tkáně. Bioaktivita je zde chápána jako pozitivní reakce organismu, tj. schopnost regenerace a následný růst kosti. Hydroxyapatit byl chemicky syntetizován metodou srážecí acidobazické titrace a z takto získané suspenze byly dále pěnováním připravovány 3D porézní hydroxyapatitové skelety, které byly následně vysokoteplotně zpracovány. Tepelně zpracované produkty byly charakterizovány měřením vybraných mechanických a fyzikálně-chemických vlastností a zachycením jejich textury pomocí elektronové mikroskopie. Bylo zjištěno, že změnou podmínek přípravy hydroxyapatitových skeletů je možno měnit jejich výsledné vlastnosti. Hodnocení připravených skeletů je doplněno studiem bioaktivity materiálů in vitro.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Anorganické pěny na bázi alumosilikátových polymerů

Autor: Bc.Zdeněk Tišler
Ročník: M2
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: doc. RNDr.František Škvára, DrSc.

Při reakci popílků s alkalickým aktivátorem ($\text{NaOH} + \text{vodní sklo}$) vznikají alumosilikátové polymery (geopolymery). V práci byl použit český odpadní elektrárenský popílek ze spalování hnědého uhlí s vysokým obsahem SiO_2 . Přísadou plynotvorných látek (Al, křemičitý úlet) při alkalické aktivaci popílků lze připravit vysoce porézní polymerní alumosilikátový materiál – nehořlavou alumosilikátovou pěnu. Mechanismus napěnění přísadou křemičitého úletu (vysoce jemný SiO_2) není přesně objasněn. Byl vypracován postup vizualizace makropórů pro digitální obrazovou analýzu. Množství resp. zrnitost plynotvorné látky (Al, křemičitý úlet) má zásadní vliv na výsledné vlastnosti polymerní alumosilikátové pěny. Ve studiu přípravy a stanovení vlastností alumosilikátových polymerních pěn bude dále pokračováno v mé magisterské práci. Cílem práce je nalezení závislostí mezi přídavkem napěňovací přísady a parametry pórů (průměrná plocha, obvod, délka, šířka, ekvivalentní průměr, kruhovitost, protažení) resp. mechanickými, termickými vlastnostmi. Tato práce je součástí výzkumného záměru MSM 6046137302 „Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro – a nanoskopických metod“.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Predikce polymorfů a možnosti jejich identifikace porovnáváním generovaných a experimentálních ssNMR dat

Autor: Štefan Auer
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Michal Hušák, Dr.

Předmětem této práce je posouzení výsledků predikce softwaru Materials Studio s experimentálními daty a určení míry shody. Pro účely predikce byla vybrána molekula alaptidu. Na molekule alaptidu byla po geometrické optimalizaci spuštěna v modulu Polymorph predikce polymorfů. Výsledky predikce polymorfů byly seřazeny podle energií a vizuálně se hledala shoda s experimentálním polymorfem. Po identifikaci správného polymorfu se přistoupilo ke zpřesňování původních výsledků. K tomuto zpřesnění byl použit modul Castep. Oproti modulu Polymorph, který počítá s rovnicemi molekulární mechaniky, jsou k výpočtům aplikovány kvantově mechanické rovnice. Po geometrické optimalizaci v modulu Castep byla zpřesněna celková energie polymorfů, což změnilo jejich pořadí oproti původní predikci ve prospěch správného polymorfu. Druhá možnost zkvalitnění predikce bylo porovnávání generovaných a experimentálních dat ssNMR. Spojením obou modulů se získá poměrně účinný nástroj k odhalování potenciálně stabilních polymorfů. Na základě shody výsledků s realitou se rozhodne, o jak účinný nástroj se jedná, a rozhodne se tak o případném využití programu v širší praxi. Výsledky této práce mohou napomoci zejména farmaceutickým firmám v předvídání potenciálně existujících polymorfů.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Katalyzátor pro likvidaci rozpouštědel z farmaceutické výroby. Elektrodepozice prekurzoru na kovový nosič

Autor: Daniel Bouša
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Emise těkavých rozpouštědel lze významně omezit jejich katalytickou totální oxidací na CO_2 a H_2O . Vysokou aktivitu v tomto procesu vykazují směsné oxidy přechodných kovů připravené tepelným rozkladem podvojných vrstevnatých hydroxidů. Práce je zaměřena na přípravu směsného oxidu Co, Mn a Al na ocelovém nosiči. Prekurzor, podvojný vrstevnatý hydroxid Co-Mn-Al s molárním poměrem kationtů 4:1:1 byl připraven elektrochemickou syntézou na povrchu nerezové oceli katodickou redukcí dusičnanů uvedených kovů. Vzhledem k rozdílnému pH, při němž se sráží jednotlivé kationty, bylo nuto optimalizovat podmínky reakce (doba reakce, potenciál, koncentrace a vzájemné poměry kationtů v roztoku). Složení produktu bylo sledováno pomocí chemické analýzy, práškové rentgenové difrakce a infračervené spektroskopie, morfologie produktu a lokální složení pak pomocí elektronové mikroskopie a mikroanalýzy. Jako nosič byla použita fólie nebo síto z nerezové oceli. Na nosiči se podařilo připravit prekurzor požadovaného chemického a fázového složení, jehož kalcinací vznikl směsný oxid se strukturou spinelu. Pro studium vlivu podmínek elektrochemické depozice na kvalitu produktu byla použita metoda faktoriálního designu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Interkalace flufenamátu do Mg-Al hydrotalcitu z roztoků voda-ethanol

Autor: Kamila Ctiborová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Kyselina flufenamová (2-[[3-(trifluormethyl)fenyl]amino]benzoová) patří mezi nesteroidní protizánětlivá léčiva a je velmi špatně rozpustná ve vodě. Interkalace do struktury Mg-Al hydrotalcitu byla provedena pomocí aniontově-výměnných reakcí ve vodě nebo v ethanolu s použitím prekurzorů v dusičnanové, chloridové a benzoanové formě. Dále byla studována interkalace s využitím rehydratační reakce směsného oxidu Mg-Al připraveného kalcinací dusičnanového prekurzoru, kdy byla kyselina flufenamová rozpuštěna ve směsích s různými poměry voda/ethanol. Aniontově-výměnnými reakcemi ve vodných roztocích se podařilo anionty kyseliny flufenamové interkalovat do všech typů prekurzorů, množství interkalovaných aniontů odpovídalo až 94 % aniontově-výměnné kapacity hostitelské struktury (AEC). V roztoku kyseliny flufenamové v ethanolu k aniontové výměně nedošlo. Analýzy použitých roztoků pomocí UV-VIS spektroskopie prokázaly imobilizaci určitého množství aniontů v pevné fázi (do 25 % AEC), pravděpodobně v důsledku adsorpce na vnějším povrchu částic. K úplné rehydrataci směsného oxidu došlo již ve směsi obsahující 85 % ethanolu, v přítomnosti rozpuštěného léčiva byla rehydratace pozorována při obsahu vody 50 %. K částečné interkalaci aniontů kyseliny flufenamové docházelo až při minimálním obsahu 70 % vody ve směsi.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Vliv statické elektřiny na degradaci farmaceutických substancí

Autor: Lucie Gruberová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V rámci mnoha projektů bylo studováno působení statického náboje na chování farmaceutických látek. Na získané poznatky navazuje studie vlivu statické elektřiny na degradaci farmaceutických substancí. Tato studie si bere za cíl prokázat možnost degradování aktivní substance během procesu zpracování farmaceutické směsi. Pro dokázání degradace byly provedeny pokusy simulující nabíjení prášku v pneumatické dopravě. Simulace probíhaly se staticky uloženým vzorkem, který byl následně vystaven působení elektrického náboje. Konkrétně byly zkoumány sloučeniny hydrochloridu buprenorfinu a chloridu tropia v prostředí korónového a doutnavého výboje. Následně byla na nabitých vzorcích provedena analýza kapalinovou chromatografií a hmotnostní spektrometrií. U analyzovaného hydrochloridu buprenorfinu byl prokázán nárůst degradačních produktů v řádech desetin procent. Struktury vzniklých degradačních nebyly prozatím přesně identifikovány. Z grafů akumulace a rozkladu náboje byla zjištěna menší schopnost nabití a udržení náboje na povrchu chloridu tropia v porovnání s hydrochloridem buprenorfinu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Chitosan a jeho sorpční vlastnosti

Autor: Radka Jankovská
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

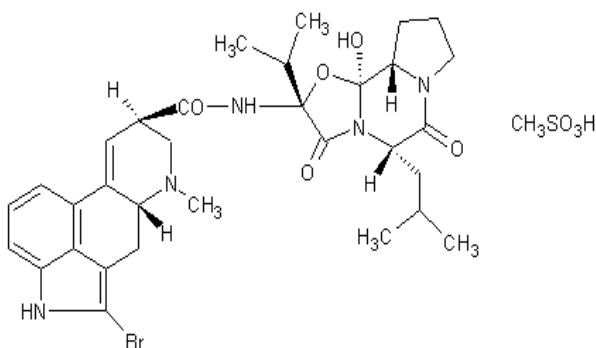
Chitosan je přírodní polymer odvozený od chitinu, po celulóse druhého nejrozšířenějšího polysacharidu. Získává se z rozdrčených schránek korýšů nebo z hub. Chitosan má výborné biologické vlastnosti, je biokompatibilní, biodegradabilní, netoxický a má silné vazebné schopnosti, což umožňuje jeho široké uplatnění v mnoha různých odvětvích. Hojně se využívá ve farmacii, kosmetice, potravinářství a při čištění vod. Na jeho kationickém charakteru jsou založeny i potravinové doplňky sloužící k redukci hmotnosti, kdy se na něj navážou volné mastné kyseliny z potravy a tím se zabrání vstřebávání tuků.

Předložená práce se zabývá sorpčními vlastnostmi čistého chitosanu a tablet obsahujících chitosan vůči oxoaniontům arsenu, které jsou pro organismus extrémně toxické. Na práškový chitosan i na rozdrčené tablety byl sorbován As z roztoku arseničnanu a arsenitanu. Cílem práce bylo potvrdit možné detoxikační schopnosti chitosanu, které by mohly být využity v oblastech nejvíce zatížených kontaminacemi arsenem (Bangladéš, Střední Amerika).

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Studium krystalizačního procesu bromokryptínu mesylátu

Autor: Iva Koupilová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.,
 RNDr. Aleš Gavenda, Ph.D.



Námelové alkaloidy jsou dobře známé ve farmaceutickém průmyslu. Vyrábí se z nich velké množství účinných látek se širokým spektrem biologické aktivity. Jednou z nich je i bromokryptin účinný hlavně v léčbě Parkinsonovy choroby, hyperprolaktinaemie a nově též cukrovky typu 2. Jeho výroba je z ergotaminu, který se izoluje z námele, jeho bromací se získává bromocryptin. S methamsulfonovou kyselinou se potom vytvoří sůl užívaná v léčivých přípravcích. Tako sůl, bromokryptin mesylát, krystalizuje

v doposud dvou známých strukturách – anhydrát a isopropanol solvát – s kavitou na stejném místě. Tato kavita je zájemem této práce pro vytvoření jiných soldátů s rozpouštědly povolenými Evropskou lékovou agenturou podle směrnice ICH.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Strukturní řady solvátů dihydro- α -ergokryptinia mesylátu

Autor: Tereza Kohoutová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Ergotoxiny, námelové alkaloidy produkované houbou paličkovici nachovou jsou ve formě kapek a tablet používány k léčbě stařecké demence, Alzheimerovy choroby, při profilaxi migrény a hyperprolaktinémii.

U ergotoxinu dihydroergocristinu byla zjištěna schopnost tvorby solvátů. Z tohoto zjištění vychází tato práce, ve které byla zkoumána schopnost solvatace Dihydro- α -ergokryptinia mesylátu v různých rozpouštědlech.

Z připravených struktur byly vyřešeny a porovnány nové struktury: Dihydro- α -ergokryptinium mesylát monohydrát acetonitril solvát a Dihydro- α -ergokryptinium mesylát monohydrát tetrahydrofuran solvát Dihydro- α -ergokryptinium mesylát monohydrát butylacetát solvát

Byl prokázán obsah rozpouštědla ve stechiometrickém poměru: 1:1 u všech analyzovaných struktur.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava a studium kokrystalů paracetamolu, kyseliny acetylsalicylové a salicylové s vybranými kokrystalizačními partnery

Autor: Bc. Martina Krzáková
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: Ing. et Dipl.-Chem. Univ. Michaela Pojarová, Ph.D.

Farmaceutický kokrystal představuje vedle solí, či hydrátů, jednu z možných pevných forem farmaceuticky aktivních látek a cílem jeho přípravy je ovlivnit vlastnosti aktivních látek např. stabilitu, rozpustnost, či manipulovatelnost během výroby. Je tvořen aktivní látkou a tzv. kokrystalizačním partnerem. Od solvátů se liší tím, že obě složky jsou v čistém stavu a za normálních podmínek pevné.

Cílem této práce je příprava farmaceutických kokrystalů na bázi paracetamolu, kyseliny salicylové a acetylsalicylové. První fází přípravy je analýza funkčních skupin, které se mohou v krystalu účastnit nevazebných interakcí. Pro vybrané aktivní látky a různé kokrystalizační partnery byl použit program CrystalExplorer, který využívá analýzu Hirshfeldových povrchů, a pKa pravidlo, které slouží k odhadu, zda vznikne sůl, kokrystal, či kontinuum sůl-kokrystal. V experimentální části byly použity následující metody: krystalizace z roztoku, společné mletí komponent za přítomnosti malého množství rozpouštědla, ultrazvuková lázeň s přísadkou rozpouštědla a krystalizace z taveniny. Podle povahy vzniklých produktů se k charakterizaci využívá rentgenová strukturní analýza monokrystalu či prášku, kdy dochází k porovnání mřížkových parametrů s údaji čistých látek, doplněná diferenciální skenovací kalorimetrií.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava fotoaktivního materiálu s antimikrobiálními účinky

Autor: Bc. Anna Ondruchová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Hydroxylové radikály se silnými oxidačními a baktericidními účinky vznikají ve vodných roztocích interakcí světla s organokomplexy obsahujícími kationty Fe^{3+} . Cílem práce je ověřit světlem iniciovanou tvorbu hydroxylových radikálů při interakci organických aniontů s železitými kationty v pevné fázi. Byly připraveny podvojně vrstevnaté hydroxidy typu Mg-Al-Fe intrterkalované anionty kyseliny ethylendiamintetraoctové (EDTA) a kyseliny šťavelové. Při přípravě vzorků byly využity metody aniontové výměny a rehydratace směsného oxidu vzniklého kalcinací dusičnanové formy podvojně vrstevnatého hydroxidu. Produkty interkalované anionty kyseliny šťavelové se podařilo připravit také koprecipitační reakcí. Úspěšná interkalace organických aniontů do mezivrstev byla potvrzena práškovou rentgenovou difrakcí a infračervenou spektroskopií. Fotoaktivita připravených vzorků byla testována při degradaci herbicidu monuronu (3-(4-chlorfenyl)-1,1-dimethylmočoviny). Práškové vzorky interkalovaných podvojných vrstevnatých hydroxidů byly přidány do vodného roztoku monuronu a byla sledována závislost koncentrace monuronu na čase při současném ozařování suspenze ultrafialovou lampou (350 – 390 nm).

Sekce: Analýza a vlastnosti léčiv

Modifikace vlastností oxidického katalyzátoru pro odstraňování těkavých organických rozpouštědel z farmaceutické výroby

Autor: Helena Raabová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Těkavá organická rozpouštědla uvolňovaná do ovzduší ve farmaceutické výrobě se často odstraňují katalytickým spalováním. Jako katalyzátory lze v těchto procesech použít směsné oxidy přechodných kovů připravené tepelným rozkladem podvojných vrstevnatých hydroxidů. Práce je zaměřena na modifikaci texturních vlastností a redukovatelnosti aktivních složek ve směsném oxidu Co-Mn-Al s molárním poměrem Co:Mn:Al = 4:1:1. V práci je studován vliv přídavku organických složek při přípravě prekurzorů na vlastnosti kalcinačních produktů. Prekurzory byly připraveny koprecipitační reakcí nebo homogenním srážením v přítomnosti triblokového kopolymeru Pluronic P123. Dalším prekurzorem byl podvojný vrstevnatý hydroxid Co-Mn-Al interkalovaný anionty kyseliny dodekanové. K charakterizaci připravených vzorků byla použita chemická analýza, prášková rentgenová difrakční analýza, měření měrného povrchu a teplotně programovaná redukce. Kalcinací prekurzorů byly získány směsné oxidy se strukturou spinelu, přítomnost organického templátu v prekurzorech měla za následek zvětšení měrného povrchu kalcinačních produktů. U vzorků modifikovaných organickými složkami byl pozorován posun redukčních maxim k nižším teplotám.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava vzorků pro SEM a FTIR pomocí mikrotomu

Autor: Michal Šimek
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V prezentované práci je představen vývoj nové metody přípravy farmaceutických vzorků pro skenovací elektronovou mikroskopii (SEM) a infračervenou spektroskopii (FTIR) pomocí mikrotomu. SEM umožňuje pozorovat a hodnotit jednotlivé vrstvy pevných lékových forem. FTIR mapping slouží k určení distribuce jednotlivých komponent v pevné lékové formě a jejich charakterizaci. Díky hladce připraveným povrchům analyzovaných vzorků pomocí mikrotomu a spojením výsledků SEM a FTIR mappingu je tedy možné určit, jak byla léková forma formulována, z jakých excipientů se skládá a jak jsou tyto v lékové formě distribuovány.

První částí práce bylo vytipování možných zalévacích hmot. Následovaly experimenty, během kterých se postupně selektovaly nejvhodnější kandidáti. Testovaly se vhodné parametry řezání, které jsou závislé přímo na vlastnostech vybraných hmot: sklon hřbetu nože, rychlost řezání a mód řezání. Na závěr jsou předvedeny výsledky pozorování připravených vzorků pomocí SEM a FTIR mappingu. Finálním výstupem práce bude zavedení mikrotomového řezání jako rutinní přípravy vzorků pro tyto techniky v oddělení Analytického vývoje společnosti Zentiva, k.s.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Kokrystal trospium chlorid - močovina

Autor: Eliška Skořepová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek (108)
Školitel: dr. Ing. Michal Hušák

Tato práce se zabývá možnostmi přípravy látky trospium chloridu ve formě kokrystalu. Trospium chlorid je léčivo používané pro léčbu inkontinence. Doposud bylo známo 6 krystalových forem – 2 anhydráty ($P2_1$ a $P2_1/c$) a 4 solváty (ethanol s. ($P-1$), methanol s. ($P2_1/n$), isopropylalkohol s. ($P2_1/n$), aceton s. ($P2_1/n$)). V tomto projektu jsme se zaměřili na přípravu kokrystalu, kvůli jeho možnému využití v průmyslové výrobě. Jako kokrystalizační partner byla zvolena močovina. Identifikace fáze byla provedena RTG práškovou difrakcí, RTG difrakcí na monokrystalu a pomocí 1H NMR. Výsledek potvrdil vznik kokrystalu s močovinou v molárním poměru 1:1 (grupa $P2_1/c$). V kokrystalizačních pokusech se podařilo najít i monokrystalu jiné fáze než kokrystalu. Tato fáze byla vyřešena jako trospium chlorid seskvihydrát ($P2_1/c$). Jako rozpouštědlo pro kokrystalizační pokusy byla použita voda. Pokusy dokazují, že si studium nových krystalových forem trospium chloridu zasluhuje další pozornost.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Kokrystalizace alaptidu

Autor: Bc. Veronika Sládková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Alaptid, spirocyklický dipeptid, stimulující regeneraci poškozených buněk a tkání, je účinnou složkou řady dermatologik a kosmetických přípravků. Limitujícím faktorem při formulaci jeho perorálních lékových forem účinných při léčbě poruch gastrointestinálního traktu a paměti je jeho malá rozpustnost ve vodě a tím i jeho nízká biologická dostupnost. Jednou z možností zvýšení rozpustnosti je příprava kokryystalu s vhodným kokrystalizačním partnerem.

Dosavadní výsledky naznačují, že alaptid je ochoten tvořit nové fáze s látkami obsahujícími amidovou skupinu (močovina). Předpoklad, že kokrystalizační partner by měl být rozpustný ve vodě, obsahovat amidovou skupinu a být biologicky nezávadný zúžil výběr na několik kandidátů. V experimentální části pak vyvstal problém s inkongruencí systému alaptid – kokrystalizační partner.

Nedávná studie přichází s metodou přípravy kokryystalu v suspenzi, která tento problém řeší a na modelovém systému kofeinu s kyselinami byla v této práci úspěšně ověřena. Vznik kokryystalů byl potvrzen pomocí RTG fázové analýzy. Výsledky kokrystalizačních pokusů s alaptidem budou součástí prezentace.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Vliv prostředí na stabilitu léčiv na bázi jílových minerálů

Autor: Petra Spurná
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Smecta je doplňkovým léčivem, obsahujícím čištěný jíl schopný adsorpce. Váže na sebe toxické látky produkované infekčními původci průjemových onemocnění, ale i jiné částice afinitní k povrchu jílové matrice.

V této práci byla sledována stabilita Smecty v prostředích s různou agresivitou. Prvním prostředím byla HCl o pH=1, které simuluje prostředí žaludku, a méně koncentrovaná HCl o pH=4. Dále bylo zkoumáno alkalické prostředí (0,1M roztok KHCO_3) a fyziologický roztok (0,9% hm. NaCl). Pro měření kinetiky degradace Smecty byl použit vsádkový režim při poměru pevná fáze-roztok 1:10 a čase 24 až 168 hodin. Vliv prostředí na stabilitu Smecty byl charakterizován na základě hmotnostních úbytků vzorku a změny pH.

Chování Smecty v různých prostředích bylo za využití shodných experimentů porovnáno s čistým bentonitem, jako zástupcem jílovité horniny s vysokou kationtově výměnnou a adsorpční kapacitou, a s živočišným uhlím, které představuje nejílové léčivo s velkým specifickým povrchem a vynikajícími sorpčními vlastnostmi.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Solvatomorfie dihydroergocorninu

Autor: Bc. Radka Zajícová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemie pevných látek (108)
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Dihydroergocornin je semisyntetický námelový alkaloid, který se ve formě mesylátu spolu s dalšími semisyntetickými alkaloidy ergotoxinové skupiny (dihydro- α -ergokrytin mesylát, dihydro- β -ergokrytin mesylát a dihydroergocristin mesylát) používá pro léčbu vysokého nitroočního tlaku a jako periferní vazodilatans.

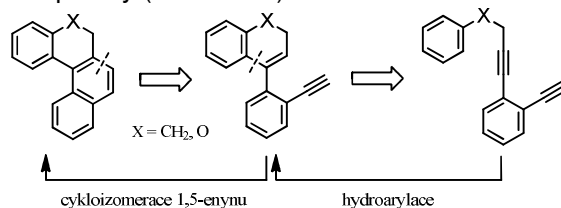
U námelových alkaloidů ze skupiny dihydroergotoxinů bylo popsáno několik strukturních typů, které se navzájem liší uspořádáním molekul v elementární buňce, vodíkovými vazbami a mřížkovými parametry. Dihydroergocornin mesylát tvoří zajímavou řadu solvátů s rozpouštědly rozdílných vlastností, přičemž tyto solváty náleží k několika strukturním typům. Cílem této práce je doplnit solvátovou řadu, porovnat nové solvatomorfy s již určenými a správně je zařadit. V současnosti byly vyřešeny struktury čtyř nových solvátů a byly přiřazeny k jednotlivým strukturním typům.

Sekce : Organická chemie M1

Intramolekulární tandemová hydroarylace/cykloizomerace vedoucí k helikálním polyaromatickým systémům

Autor: Martin Bernard
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.; konzultant: Ing. Jan Storch, Ph.D.

Cykloizomerace enynů katalyzovaná přechodnými kovy je jednou z nejdůležitějších strategií k přípravě sofistikovaných cyklických struktur. Mezi přechodnými kovy, které se při těchto přeměnách používají, má využití sloučenin platiny mnoho výhod: práce s nimi je bezpečná a jednoduchá, nevyžaduje striktně inertní podmínky. Tato práce popisuje nový přístup k syntéze helikálních struktur jako je 6H-nafto[2,1-c]chromen a 5,6-dihydrobenzo[c]fenanthren. Využívá přitom nově vyvinutou intramolekulární tandemovou hydroarylací/cykloizomerací katalyzovanou sloučeninami platiny (Schema 1).

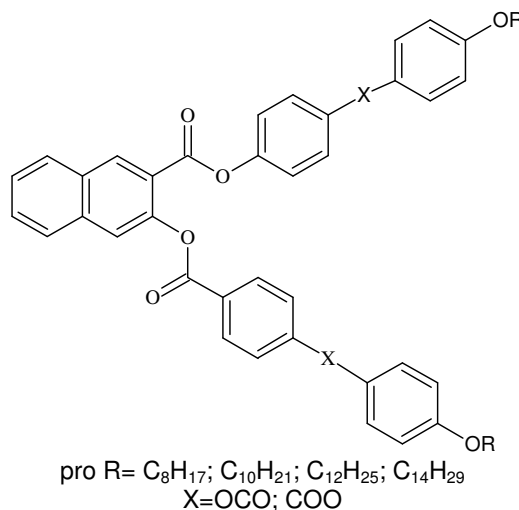


Schema 1

Nové kapalně krystaly na bázi 3-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny

Autor: Eva Rodinová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda CSc.

Práce byla zaměřena na syntézu nových lomených kapalných krystalů s malým úhlem zalomení. Jako centrální jádro těchto molekul byla využita 3-hydroxynaftalen-2-karboxylová kyselina. Byly připraveny prodlužující řetězce s různě dlouhými koncovými alkyly (C_8 , C_{10} , C_{12} , C_{14}). Tyto materiály byly použity pro přípravu dvou sérií látek, které měly v prodlužujících ramenech obrácenou polaritu esterové spojky. Mezomorfní vlastnosti připravených derivátů byly studovány na Fyzikálním ústavu Akademie věd ČR.

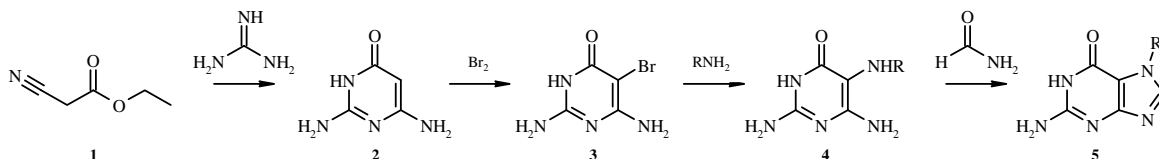


N7 Substituované deriváty guaninu

Autor: Anna Šuláková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

N7 Substituované deriváty guaninu patří mezi DNA adukty, tedy látky vznikající v organismu kovalentní vazbou elektrofilních činidel na nukleobase DNA. Modifikované nukleobase jsou po odštěpení z DNA vylučovány močí, a lze je tak využít jako specifické markery poškození DNA. Nyní je třeba nalézt účinnou a selektivní metodu přípravy N7 substituovaných guaninů, která by umožnila využít je jako autentické standardy při analýze tvorby a vylučování těchto aduktů.

V této práci je studována syntetická cesta vycházející z ethyl-kyanoacetátu (1). Ten je nejprve kondenzován s guanidinem a vzniklý 2,6-diamino-4-hydroxypyrimidin (2) je podroben bromaci do polohy 5. Klíčovým krokem celé transformace je pak Buchwald-Hartwigova reakce 2,6-diamino-5-brom-4-hydroxypyrimidinu (3) prováděná s alkyl- a arylaminy. Tento krok se však ukazuje jako problematický vzhledem k přítomnosti dalších funkčních skupin v molekule. Proto bude nutno nalézt vhodnou metodu chránění pyrimidinu (3), případně jinou syntetickou cestu využívající kondenzace 2-alkyl a 2-arylaminoxyanoacetátů s guanidinem.

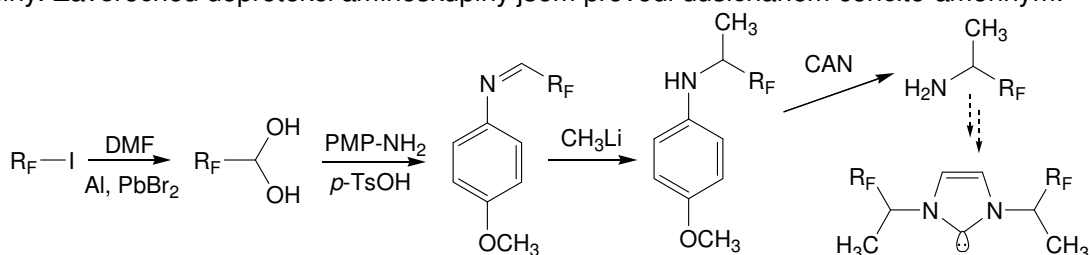


Příprava aminů se sekundárním polyfluoralkylovým řetězcem

Autor: Ondřej Šimůnek
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Dusíkaté heterocyklické karbeny (zkr. NHC) jsou významnými ligandy přechodných kovů, přičemž jejich polyfluoralkylová analoga jsou v současné době téměř neznámá. Cílem této práce je syntéza aminů se sekundárním polyfluoralkylovým řetězcem jako intermediátů v syntéze fluorovaných NHC ligandů.

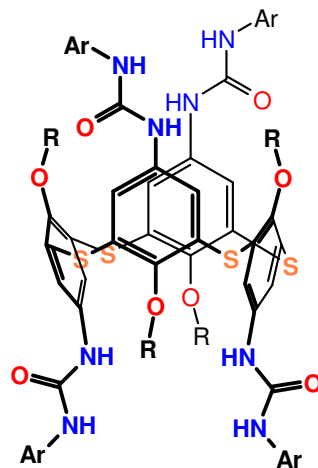
Jako výchozí látky jsem použil odpovídající perfluoralkyljodidy ($R_F = C_6F_{13}$ nebo C_8F_{17}), které s *N,N*-dimethylformamidem, hliníkem a bromidem olovnatým poskytly geminální dioly. Ty jsem poté reakcí s *p*-anisidinem převedl na iminy, které byly alkylovány methyllithiem na sekundární aminy. Závěrečnou deprotektci aminoskupiny jsem provedl dusičnanem ceričito-amonným.



Syntéza prekurzorů aniontových receptorů na bázi thiacalix[4]arenu

Autor: Michaela Mačková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Thiacalixareny patří do skupiny sloučenin, jejichž modifikací lze připravit deriváty, které vykazují zajímavé komplexační vlastnosti. Jedním z důležitých meziproductů v syntéze aniontových receptorů je 5,11,17,23-tetranitrothiacalixaren-25,26,27,28-tetraol, který je snadno dostupný, ale bohužel velmi špatně rozpustný. Tato vlastnost významně omezuje možnosti jeho transformace, a tím znemožňuje jeho praktické využití v supramolekulární chemii. Alkylací spodního okraje však získáme lépe rozpustný derivát, který bude možné snáze redukovat na horním okraji. Cílem práce je vypracování metody syntézy 5,11,17,23-tetraamino-25,26,27,28-tetraalkylthiacalixarenů, které bude možné dále převést na odpovídající (thio)močoviny, jejichž potenciální komplexační vlastnosti vůči aniontům budou následně studovány.

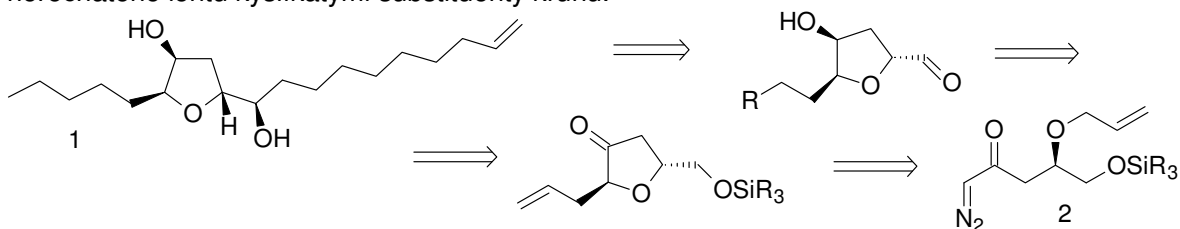


Na cestě k syntéze (6S,7S,9R,10R)-6,9-epoxynonadec-18-ene-7,10-diolu, přírodního antiparazitika

Autor: Tomáš Mašek
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cílová sloučenina (1) byla izolována z mořské chaluhy *Notheia anomala* a vykazuje silné antiparazitické účinky (anthelmintikum). Její pravděpodobná biosyntéza zahrnuje epoxidaci a cyklizaci kyseliny *cis,cis*-eikosadienové.

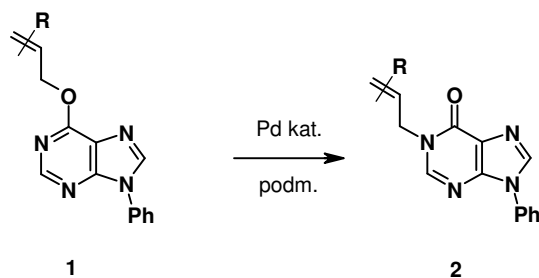
Prezentovaná totální syntéza je ukázkou využití univerzální metody konstrukce 2,5-*trans*-disubstituovaných tetrahydrofuran-3-onů pomocí mědi katalyzované cyklizace β -allyloxy diazoketonů (2) s následným přesmykem vzniklých allyloxonium ylidů. Finálním krokem syntézy je stereospecifická adice Grignardova činidla na chirální cyklický aldehyd, řízená chelatací hořečnatého iontu kyslíkatými substituenty kruhu.



Pd-katalyzovaný přesmyk 6-allyloxypurinů

Autor: Petr Koukal
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Purinové deriváty jsou známy zejména svojí biologickou aktivitou. Z chemického, ale i biologického hlediska je zajímavá syntéza 1-allylhypoxanthinových derivátů. Jejich příprava byla již provedena pomocí Claisenova přesmyku, ovšem za vysoké teploty (190 °C). Proto jsme vypracovali novou metodiku, založenou na palladiem katalyzované přeměně 1 na hypoxanthinové deriváty 2. V příspěvku bude diskutován vliv použitého katalyzátoru, reakčních podmínek a struktury výchozích látek 1 při přeměně na produkt 2.



Neočakávaná reakcia pri syntéze katalyzátoru na báze izochinolínu: mechanistická štúdia

Autor: Michal Májek

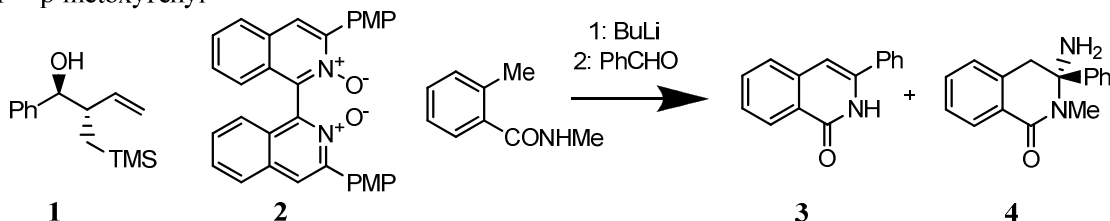
Ročník: M2

Ústav: School of Chemistry, University of Glasgow, UK

Školitel: Pavel Kočovský, PhD, DSc, FRSC, Sir William Ramsay Professor of Chemistry

Homoalylové alkoholy typu **1** sú častým medziproduktom pri syntéze liečiv a prírodných látok vďaka tomu, že sú jednoducho dostupné pomocou enantioselektívnej reakcie aldehydov s alkyltrichlórsilánmi za katalýzy chirálnymi Lewisovými bázami. Syntetizovali sme organokatalyzátor tejto reakcie **2** a vypracovali sme metodiku derivatizácie dvojitej väzby alkoholov **1**. Počas syntézy katalyzátoru **2** sme okrem očakávaného medziproduktu **3** izolovali aj dosiaľ nepopísaný stabilný aminál **4**. Syntéza laktámov **3** je častým predmetom patentového chránenia zo strany farmaceutického priemyslu, venovali sme sa preto najmä štúdiu mechanizmu tejto reakcie a vypracovali sme metodiku selektívnej syntézy látok **3** a **4**.

PMP = p-metoxifynyl



Využití sulfoxidů při reakcích na horním okraji calixarenu

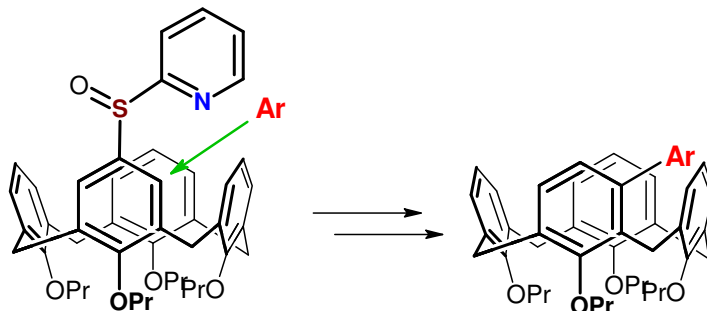
Autor: Jan Holub

Ročník: M2

Ústav: Organické chemie

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.; Ing. Ondřej Kundrát, Ph.D.

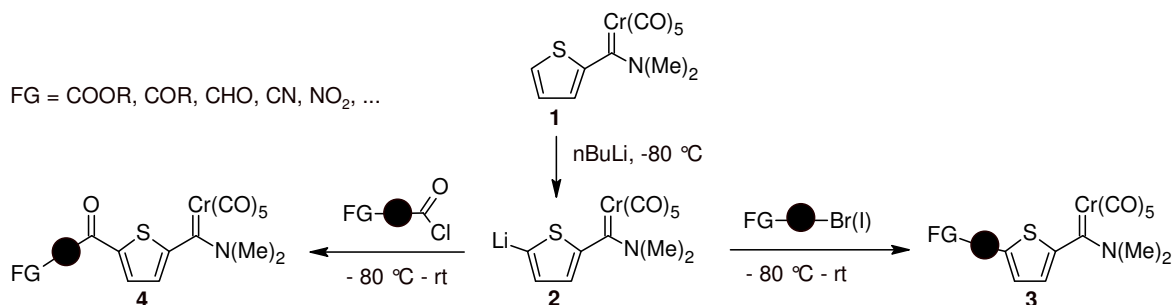
Palladiem katalyzované reakce, jako jsou Heckova reakce nebo Negishiho coupling, představují elegantní a jednoduchý způsob derivatizace aromatických systémů. Tyto reakce jsou užitečným nástrojem i v chemii calixarenů. Je známo mnoho příkladů jejich využití při reakcích na horním okraji calixarenového skeletu, avšak tyto postupy se většinou omezují na snadno přístupnou polohu *para*. Reakce v poloze *meta* nabízející do budoucna zajímavá využití jsou stále málo prozkoumanou syntetickou cestou. Ve své práci se proto snažím aplikovat nový syntetický přístup - zavedením sulfoxidových derivátů pyridinu do *para*-polohy aktivovat polohu *meta* pro palladiem katalyzované reakce.



Příprava lithiovaných aminokarbenových komplexů chromu a jejich reakce s elektrofilí

Autor: Ivana Jurásková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Příprava aminokarbenových komplexů chromu je omezena na postupy, které neumožňují přípravu funkcionalizovaných karbenových komplexů. Proto jsme vypracovali vhodnou metodiku pro přípravu substituovaných aminokarbenových komplexů chromu využívající reakci lithiovaných karbenových komplexů s různými elektrofilí. Modelovou sloučeninu **1** lze účinkem *n*BuLi deprotonovat v poloze 5 za vzniku lithiovaného komplexu **2**, který je stabilní pouze při -80 °C. Ukázalo se, že připravený derivát **2** ochotně reaguje s reaktivními halogenderiváty, respektive chloridy karboxylových kyselin za vzniku koncových produktů **3**, **4**.

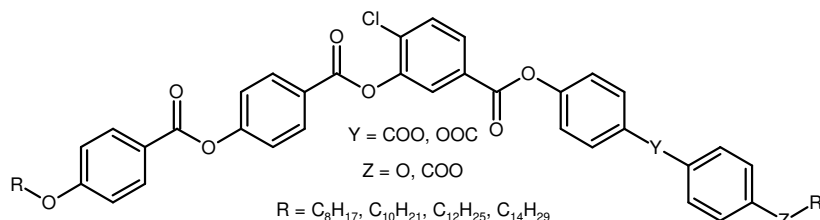


Nové lomené kapalně krystalné krystaly na bázi 4-chlor-3-hydroxybenzoové kyseliny

Autor: Jiří Tůma
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Lomené kapalně krystaly jsou již dlouhou dobu předmětem intenzivního výzkumu, především díky svým aplikacím v zobrazovací technice. Bylo prokázáno, že mesomorfní chování lze mimo jiné modifikovat vhodnou laterální substitucí centrálního jádra, délkou terminálního alkylového řetězce, či volbou typu a orientace spojek mezi aromatickými jádry.

Připravil jsem sérii dvanácti látek odvozených od 4-chlor-3-hydroxybenzoové kyseliny. Jednotlivé materiály se navzájem liší orientací esterové spojky Y, volbou terminální spojky Z a délkou koncového alkylového řetězce. Cílové materiály byly studovány pomocí diferenční



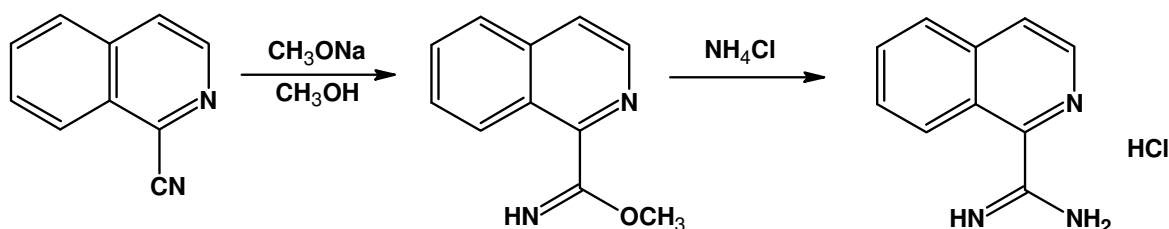
skenovací kalorimetrie a optické polarizační mikroskopie. Jejich vlastnosti jsem srovnal s dříve připravenými sériemi odvozenými od 4-fluor, resp. 4-methyl-3-hydroxybenzoové kyseliny.

Supramolekulární chemie amidinů a jejich derivátů

Autor: Jiří Mikšátko
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Amidinová skupina a deriváty od ní odvozené jsou schopny vytvářet silné vodíkové interakce a pomocí volných elektronových párů na atomech dusíku mohou tvořit komplexy s různými kovy. Z tohoto důvodu mají velké využití v krystalovém inženýrství a supramolekulární chemii, kde mohou sloužit jako vhodné stavební kameny pro metal-organic frameworks nebo jako řídicí transportní skupiny v medicínské chemii.

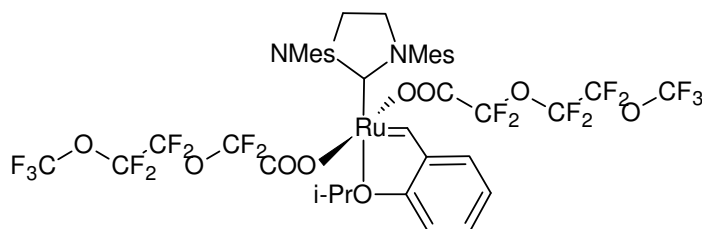
Tato práce se zabývá jednak studiem nekovalentních vazebných možností derivátů pyridinu nesoucích amidinovou skupinu a její cyklické homology a rentgenostrukturní analýzou takto vzniklých krystalových struktur. A dále pak přeměnou nitrilu na amidinovou funkční skupinu u isochinolin-1-karbonitrilu a chinolin-2-karbonitrilu.



Syntéza fluorovaných rutheniových komplexů

Autor: Jan Hošek
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvičala, CSc.

Fluorové separační techniky lze s výhodou využít pro recyklaci katalyzátorů. Mým prvním úkolem byla příprava rutheniových komplexů s perfluoralkylovými řetězci substitucí atomů chloru vázaných na centrální ruthenium. Připravenými stříbrnými solemi perfluorkarboxylových a perfluorpolyoxakarboxylových kyselin jsem modifikoval Grubbsův katalyzátor 1. generace a Hoveyduv-Grubbsův katalyzátor 1. a 2. generace. Katalytickou aktivitu nově připravených katalyzátorů jsem studoval na metatezi alkenů s uzavřením cyklu (RCM). Paralelně jsem se zabýval prvními kroky syntézy dusíkatého heterocyklického karbenu (NHC ligandu) s polyfluoralkylovými řetězci vázanými v pozicích 4 a 5 imidazolidinového cyklu.

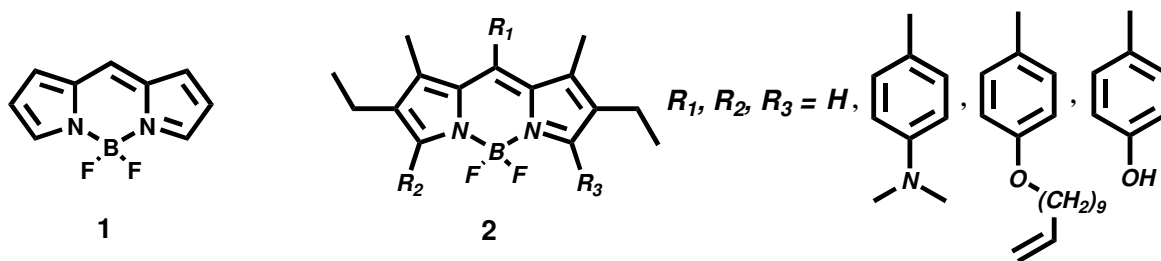


Nové typy kvapalno krystalických fluorescenčných farbív (BODIPY) a ich využitie

Autor: Michal Pozník
 Ročník: M2
 Ústav: Organická chemie
 Školiteľ: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

4,4-Difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacén (**BODIPY**) **1** je heterocyklický systém, ktorý má vynikajúce vlastnosti ako fluorescenčné farbivo. Jedná sa o stabilný skelet so širokou možnosťou derivatizácie a tónovateľnosti jeho spektroskopických vlastností pri zachovaní vysokého kvantového výťažku.

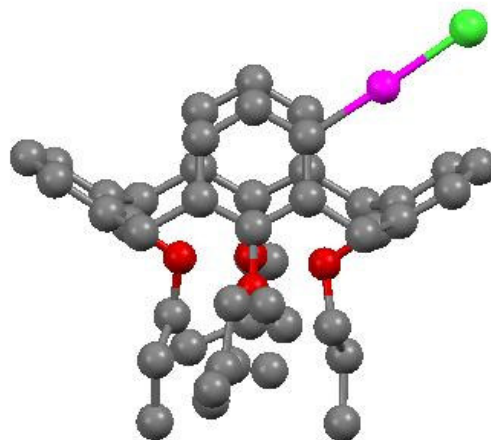
V našej práci sme sa sústredili na syntézu nových typov BODIPY **2**, ktorých emisia je posunutá do blízkej infračervenej oblasti a niektoré boli zároveň modifikované alkylthiolovými, alebo sulfidovými skupinami, ktoré umožňujú kotvenie na zlate.



Příprava *meta*-substituovaných derivátů calixarenu

Autor: Petr Slavík
 Ročník: M1
 Ústav: Organická chemie
 Školiteľ: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

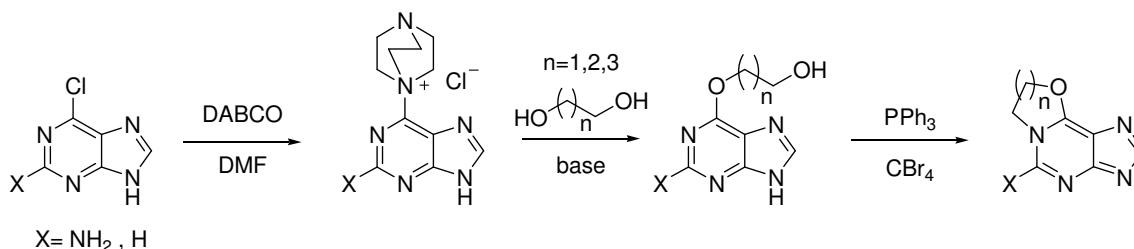
Při elektrofilní aromatické substituci na calixarenovém skeletu dochází k reakci v *para*-poloze díky elektronovému vlivu alkoxy skupiny na dolním okraji. V průběhu studia selektivních jodací calixarenu jsme objevili velmi nestandardní chování trifluoracetátu rtuťnatého. Merkurace tertaalkoxy calixarenu vedla k substituci v *meta*-poloze a tedy ke vzniku chirálních produktů. Toto chování je v chemii calixarenu zcela atypické a zatím nebylo publikováno v literatuře. Práce se zabývá jak studiem samotné merkurace, tak dalším využitím merkuriovaných calixarenu pro přípravu chirálních prekurzorů složitějších receptorů.



Intramolekulární cyklizace O^6 -hydroxyalkoxypurinů

Autor: Kateřina Zacharovová
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

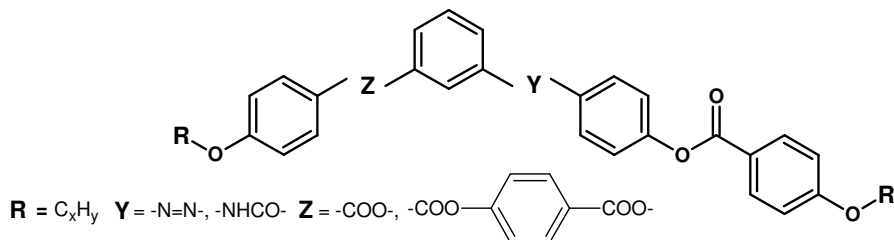
Aktivace 6-chlor-2-aminopurinu pomocí DABCO je známou metodou k usnadnění reakce s nukleofily. V přítomnosti alkoholů a base vznikají O^6 -alkylované deriváty guaninů. V této práci byl jako alkohol použit ethylenglykol, propan-1,3-diol a butan-1,4-diol. Během pokusů o transformaci hydroxyskupiny vzniklých hydroxyalkoxy derivátů na lépe odstupující skupinu došlo k uzavření kruhu na dusíku N1 a tím ke vzniku odpovídajících tricyklických derivátů. Nejlepších výtěžků bylo dosaženo reakcí s $\text{PPh}_3/\text{CBr}_4$. Reakce byly prováděny jak s 6-chlor-2-aminopurinem, tak s 6-chlorpurinem. Vzniklé cyklické produkty mohou nalézt uplatnění jako biologicky aktivní látky.



3-Aminofenol – nové centrální jádro lomených kapalných krystalů

Autor: Martin Horčík
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V rámci systematického studia lomených kapalných krystalů jsme připravili kapalně krystalické krystaly obsahující ve struktuře 3-aminofenol. Derivatizací tohoto centrálního jádra jsme syntetizovali 3 série lomených kapalných krystalů lišící se orientací esterových vazeb a délkou terminálních řetězců. Dále jsme ho využili pro design nových kapalně krystalických molekulových přepínačů zavedením fotochromní azoskupiny. V této práci bude diskutována syntéza, její úskalí, a také mesomorfni vlastnosti připravených materiálů.

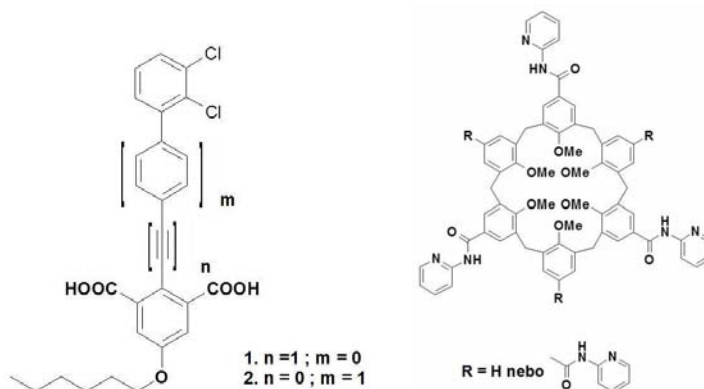


Nosiče molekulárních rotorů na bázi calix[6]arenů

Autor: Barbora Podlešáková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc., Ing. Miroslav Dudič, Ph.D. (ÚOCHB)

Calix[6]areny patří mezi hlavní pilíře supramolekulární chemie. Vhodnou substitucí spodního a horního okraje calix[6]arenu lze syntetizovat prekurzory využitelné pro přípravu různých supramolekulárních systémů, které se mohou stát důležitou součástí nanotechnologií (molekulární rotory, nanosenzory, molekulární přepínače, cílená doprava léčiv apod.).

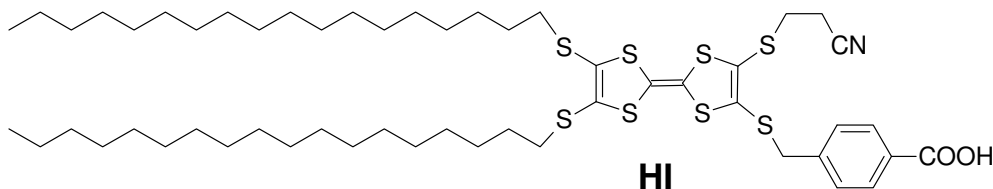
Úkolem této práce je příprava molekulárních nosičů právě na bázi calixarenů a rotorů. Jako molekulární nosiče byly navrženy calix[6]areny nesoucí methoxy skupiny na spodním a amido-2-pyridyly na horním okraji. Molekulární rotory se pak skládají ze tří částí: hlavice s dipolárním momentem, spojnice a vhodně substituovaný aromatický kruh pro ukotvení v kavitě calixarenu. Návrhy příprav a současná rozpracovanost těchto komponent budou hlavním tématem prezentace.



Elektron-donorové ligandy s TTF-skupinami

Autor: Jan Holec
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

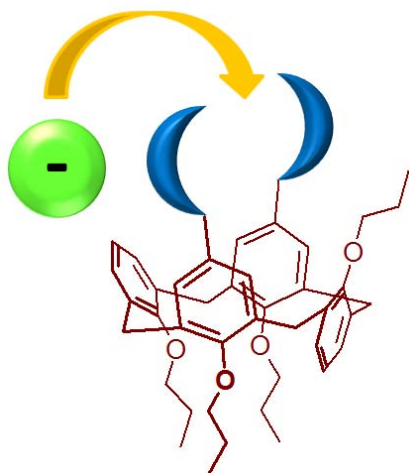
Tetrathiafulvalenové jádro je elektronově bohaté, a proto jsou TTF-deriváty schopny interakce s elektron-deficitními systémy. Pro studium komplexace s molekulami fullerénů byla syntetizována řada ligandů nesoucích tři nebo čtyři ramena s TTF-jednotkami. Vedle toho jsme se zaměřili na přípravu amfifilních derivátů s jednou TTF skupinou (např. vzorec I), které jsou vhodné pro studium interakce s fullerény v monovrstvách.



Sekce : Organická chemie M3

Nová metoda syntézy aniontových receptorů na bázi arylureidocalix[4]arenů

Autor: Oldřich Hudeček
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



Velmi aktuálním tématem v oboru supramolekulární chemie je v posledních letech syntéza a studium aniontových receptorů. V chemii calix[4]arenů se nejčastěji využívají deriváty nesoucí arylureido skupiny na horním okraji. Navzdory tomuto faktu však nabyly dosud publikovány prakticky žádné studie zabývající se receptory v *částečně kónické* konformaci, což je způsobeno nedostatkem selektivních metod k jejich syntéze.

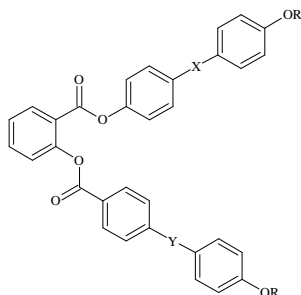
V rámci této práce byl zkoumán deaktivující vliv *p*-nitrobenzensulfonyloxy skupiny na regioselektivitu elektrofilní substituce horního okraje. Díky této nové metodě byly získány prekursor v *kónické*, *částečně kónické* a *1,2-střídavé* konformaci.

Ve snaze rozšířit znalosti supramolekulární chemie těchto derivátů bylo syntetizováno několik nových arylureido receptorů, jejichž komplexační vlastnosti vůči aniontům byly studovány pomocí klasických ^1H NMR technik. Syntetická metoda a výsledky titračních experimentů budou diskutovány v rámci prezentace.

Sekce : Organická chemie M3

Syntéza nových kapalných krystalů odvozených od kyseliny salicylové

Autor: Kvetoslava Bajžíková
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.



X = COO, OOC

Y = COO, OOC

R = C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$, $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$, $\text{C}_{14}\text{H}_{29}$

Táto práca sa zaoberala syntézou nových lomených kvapalných kryštálov s malým uhlom zalomenia, u ktorých bola ako centrálné jadro zvolená kyselina salicylová.

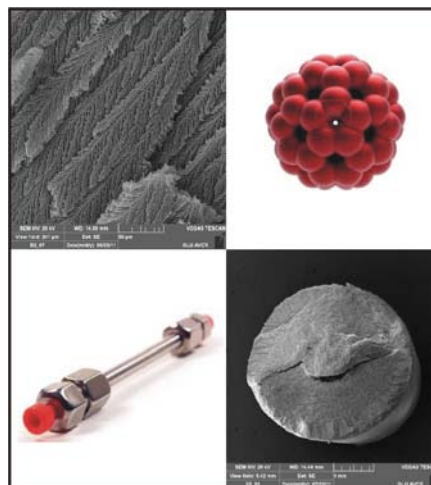
Boli pripravené štyri predĺžovacie reťazce s C_8 , C_{10} , C_{12} a C_{14} dlhými alkylmi, ktoré boli následne použité na syntézu jednej série konečných látok. V ďalšej sérii látok bol sledovaný vplyv obrátenej polarite esterovej spojky na mezomórné chovanie pripravených derivátov.

Produkty a medziprodukty boli analyzované pomocou spektroskopických metód. Mezomórné chovanie pripravených látok bolo zistené na Fyzikálnom ústave Akadémie vied ČR.

Nové perspektivní materiály pro separaci (nejen) vyšších fullerenů

Autor: Jan Slavíček
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Dnešní syntetická chemie, farmaceutický i další průmysl klade stále vyšší nároky na čistotu využívaných prekursorů spolu s důrazem na ekonomii provozu. Čistý prekursor nelze získat bez řádné separace, přičemž ekonomie vyžaduje rychlost a efektivnost separačního procesu. Proto je výzvou připravovat nové perspektivní materiály pro separaci látek, které jsou už i dnes dostupné, ale jejichž využití brání neefektivnost a ekonomická náročnost prováděné separace. Ve své práci se zabývám třemi typy separací a to HPLC, orientovanými strukturami a separací z roztoku. Jako receptory využívám mnou syntetizované deriváty porfyrinů, calix[n]arenů a jejich konjugátů, ze kterých vytvářím novými i běžnými postupy materiály, které se osvědčují především v separaci vyšších fullerenů, u nichž je dodnes separace velice náročná a nákladná.

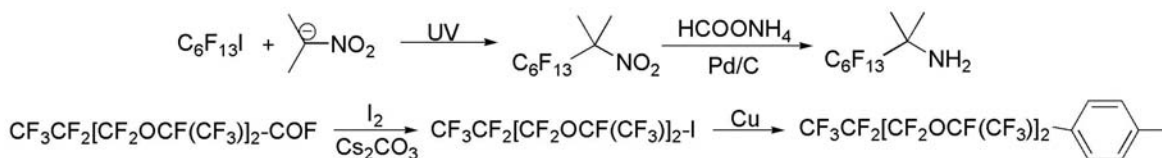


Fluorové aminy s terciární alkylovou skupinou

Autor: Ladislav Plaček
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Fluorové NHC ligandy zlepšují stabilitu a katalytickou účinnost katalyzátorů pro metatezi alkenů a umožňují jejich recyklaci pomocí fluorových separačních metod. Potenciálními prekurzory pro přípravu nových fluorových NHC ligandů jsou primární aminy substituované terciárními polyfluoralkylovými skupinami.

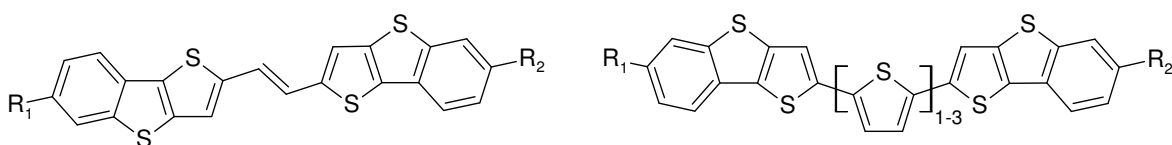
Požadované aminy jsem připravil fotochemickou perfluoralkylací 2-nitropropanidového aniontu a následnou redukcí vzniklých nitrosloúčenin. Pro redukci 2-nitro-2-perfluoralkylpropanů se nejlépe osvědčil mravenčan amonný a palladium jako katalyzátor, zatímco publikovaná katalytická redukce vodíkem poskytla složitou směs produktů. Paralelně jsem odbouráním trimeru HFPO získal perfluoropolyoxaalkyljodid jako nový typ fluorovaného polyetherového stavebního bloku, jehož reaktivitu jsem ověřil na modelové Ullmanově reakci s 4-jodtoluenem.



Syntéza nových heterocyklických sloučenin pro použití v elektronice

Autor: Ondřej Píša
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V dnešní době v elektronice dominují polovodivé materiály na bázi amorfního křemíku a OFET (Organic Field-Effect Transistors) představují jejich levnou alternativu. Pro použití v praxi je nutné, aby dosahovaly vysoké vodivosti a stability. Ve své práci se zabývám syntézou derivátů thienobenzothiofenu, které by mohly být v této oblasti slibnými kandidáty. Cílem je připravit sloučeniny s bohatou konjugací a vysokou elektronovou hustotou.



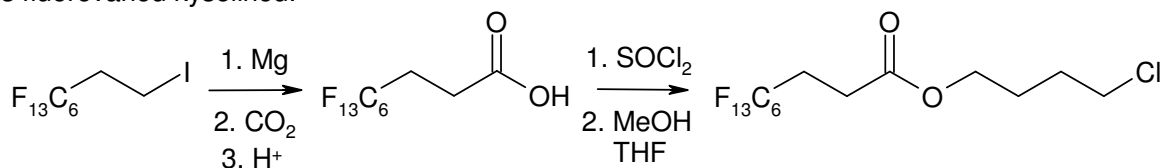
R₁= H, hexyl, Ph₂N
R₂= H, hexyl, 2-methylenmalononitril

Příprava esteru perfluorované kyseliny s nefluorovanou ethylenovou spojkou

Autor: Lucie Rathouská
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, Csc.

α -Diketony jsou klíčovými intermediáty pro syntézu 4,5 disubstituovaných NHC ligandů (dusíkatých heterocyklických karbenů). Cílem mé práce bylo připravit ester 3-(perfluorhexyl)propionové kyseliny s nefluorovanou ethylenovou spojkou jako prekurzor dosud nepublikovaných polyfluorovaných α -diketonů.

Prvním krokem byla reakce 2-(perfluorhexyl)ethyljodidu s hořčíkem za vzniku Grignardova činidla, které bylo dále převedeno působením CO₂ na požadovanou kyselinu. Její esterifikací v THF jsem získala neočekávaný produkt, který pravděpodobně vznikl otevřením tetrahydrofuranového cyklu vlivem kyselého prostředí a následnou reakcí halogenalkoholu s fluorovanou kyselinou.



Sekce : Organická chemie B1

Syntéza merkapturových kyselin vznikajících metabolismem styrenu

Autor: Milan Mališ
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Igor Lingart, CSc., Ing. Jan Krouželka

Styren je v průmyslu hojně využívaná látka např. při výrobě polymerních materiálů, pryskyřic a nátěrových hmot. Proto dochází k expozici pracovníků výpary styrenu, kterou lze biologicky monitorovat stanovením jeho metabolitů.

N-Acetyl-S-(2-hydroxy-1-fenylethyl)-L-cystein a N-acetyl-S-(2-hydroxy-2-fenylethyl)-L-cystein jsou již dlouho známé produkty detoxikace styrenu cestou merkapturových kyselin. Nově nalezené minoritní metabolity v moči - tři isomerní vinylfenylmerkapturové kyseliny N-acetyl-S-(2-vinylfenyl)-L-cystein, N-acetyl-S-(3-vinylfenyl)-L-cystein, N-acetyl-S-(4-vinylfenyl)-L-cystein, odhalili novou metabolickou cestu.

V této práci popisujeme přípravu těchto tří vinylfenylmerkapturových kyselin arylací dimethylesteru N,N'-diacetyl-L-cystinu s vinylfenylboronovými kyselinami a následující hydrolýzou vzniklých methylesterů.

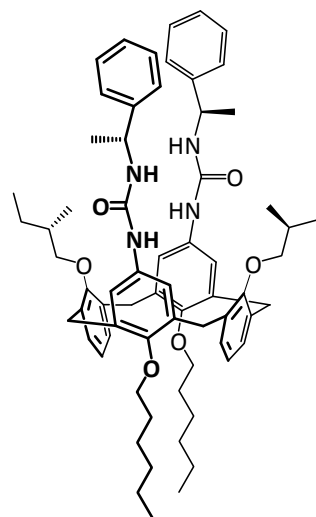
N-acetyl-S-(2-hydroxy-1-fenylethyl)-L-cystein a N-acetyl-S-(2-hydroxy-2-fenylethyl)-L-cystein byly připraveny v literatuře popsanou reakcí N-acetyl-L-cysteinu nebo jeho methylesteru s fenylloxiranem a následnou hydrolýzou. Všechny připravené látky byly využity jako analytické standardy pro analýzu moči ve studiích metabolismu styrenu.

Sekce : Organická chemie B1

Syntéza chirálních aniontových receptorů na bázi calix[4]arenu

Autor: Filip Botha
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

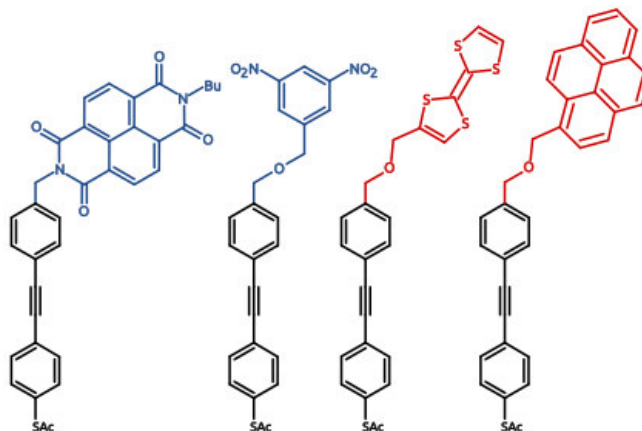
Chemická, a o to více biologická aktivita jakékoliv chirální substance závisí na její konfiguraci. Právě proto je design, syntéza a vztah mezi strukturou a aktivitou extrémně vitální oblastí bádání. Cílem této práce je syntéza aniontových receptorů - bis(fenylureido)derivátů calix[4]arenu v *1,3-alternující* a *částečně kónické* konformaci se zavedenou chiralitou v alkylových řetězcích a v močovinovém motivu. V budoucnu budou provedeny komplexační studie připravených látek s chirálními substráty a pokusy o krystalizaci komplexů s anionty.



Příprava elektrondonorních a elektronakceptorních ligandů, jejich ukotvení na Au nanočásticích a fyzikálně-chemická charakterizace

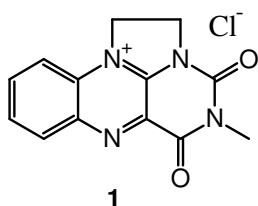
Autor: Jiří Janoušek
Ročník: B3
Ústav: Analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Na Au nanočástice byly zakotveny organické ligandy pomocí thiolových skupin. Byly tak získány Au nanočástice funkcionizované elektronakceptorními a donorními ligandy. Následně byly studovány fyzikálně-chemické vlastnosti funkcionizovaných Au nanočástic včetně jejich uspořádání do monovrstvy.



Lipofilní N3-Alkyl-N1,N10-ethylidenalloxaziniové soli jako katalyzátory oxidací sulfidů ve dvoufázovém prostředí

Autor: Jan Zelenka
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Cibulka Radek, Ph.D.



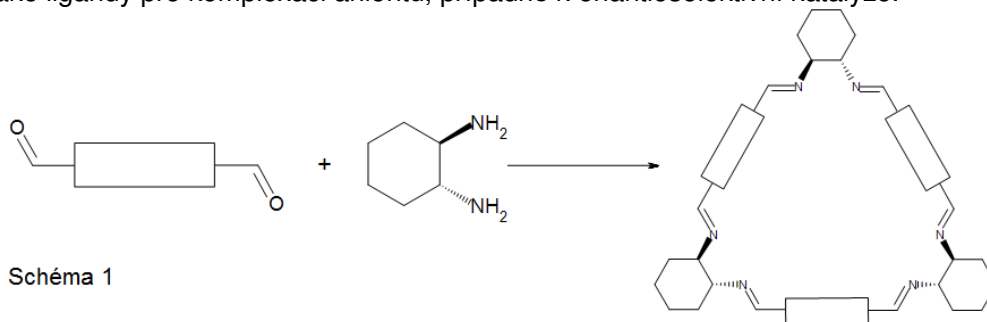
- R
a C₄H₉
b C₈H₁₇
c C₁₂H₂₅

Flaviniové soli jsou známy pro svou schopnost katalyzovat oxidaci sulfidů na sulfoxidy s využitím peroxidu vodíku či kyslíku jako stechiometrického oxidačního činidla. Problémem těchto oxidací v homogenním prostředí může být rychlá nekatalyzovaná reakce, která například snižuje enantiosektivitu oxidací katalyzovaných chirálními flaviniovými solemi. Řešením může být provedení reakce ve dvoufázovém prostředí. V práci byla syntetizována série amfifilních flaviniových solí **1**, které byly studovány jako katalyzátory oxidace thioanisolu v systému voda – organické rozpouštědlo. Byl studován vliv délky alkylového řetězce soli **1**, pH vodné fáze a druhu rozpouštědla na katalytickou účinnost systému.

Syntéza polyazamakrocyklů pomocí [3+3] cyklokondenzace *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu s rigidními dialdehydy

Autor: Daniel Bím
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

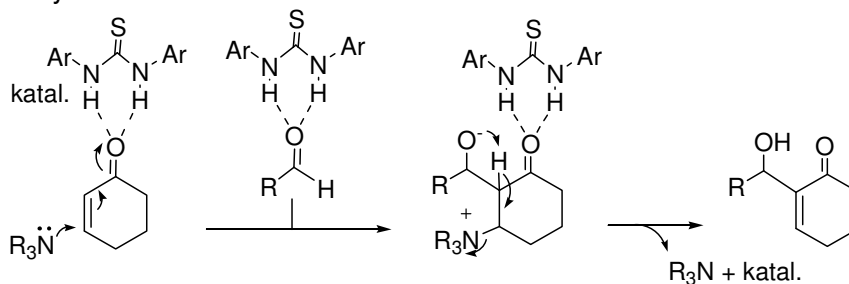
Cyklokondenzační reakce enantiomerně čistého *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu poskytuje s rigidními polyaromatickými dialdehydy v téměř kvantitativním výtěžku chirální [3+3] hexa-Schiffovy báze (viz Schéma 1). Práce je zaměřena na syntézu velkých trojúhelníkových makrocyklů a jejich následnou redukci na příslušné hexaaminy, které mohou být dále využity např. jako ligandy pro komplexaci aniontů, případně k enantioselektivní katalýze.



Moritova-Baylisova-Hillmanova reakce katalyzovaná sloučeninami na bázi močoviny

Autor: Ondřej Kollár
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Moritova-Baylisova-Hillmanova reakce katalyzovaná organickými katalyzátory je vhodná metoda pro syntézu funkcionalizovaných allylových alkoholů. Ty jsou syntetizovány z jednoduchých aldehydů reakcí s elektronově chudými alkeny. Nekatalyzovaná reakce probíhá za laboratorních teplot po dobu několika dnů. Cílem práce je syntetizovat organické katalyzátory na bázi thiomčoviny zvyšující rychlost reakce. Vzhledem k tomu, že produkt reakce obsahuje chirální centrum, bylo by zajímavé připravit katalyzátory, které jsou chirální a vedly by k enantioselektivní reakci. Pro tento účel budou používány sloučeniny využívající modifikovaný skelet 1,1'-binaftylu.



Syntéza DNA aduktů odvozených od *o*- a *p*-benzochinonu

Autor: Antonín Králík
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Benzen, jakožto součást automobilových paliv, je velmi rozšířeným polutantem a prokázaným karcinogenem. Jeho metabolickými přeměnami vznikají mimo jiné silně elektrofilní *o*- a *p*-benzochinon, které poté atakují nukleofilní centra DNA-bází za tvorby tzv. aduktů. Cílem práce je vyvinout metody přípravy některých těchto aduktů, které poslouží jako standardy pro analýzu moči exponovaných jedinců. Dosud jsem úspěšně syntetizoval dvě z těchto látek.

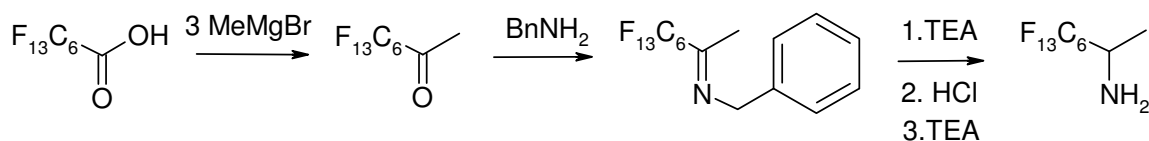
Při přípravě 7-(3,4-dihydroxyfenyl)guaninu jsem vycházel z chráněného *N*²-(dimethylaminomethylen)guaninu, který jsem v přítomnosti Cu²⁺ iontů aryloval (3,4-dimethoxyfenyl)boronovou kyselinou. Následovala deprotektace NH₂-skupiny kyselou hydrolyzou a demethylace thiofenolátem. *N*²-(4-hydroxyfenyl)-8-hydroxyguanin jsem připravil kondenzací 5,6-diamino-2-thiouracilu s močovinou, následnou substitucí SH-skupiny bromem a reakcí vzniklého derivátu se 4-aminofenolem.

Syntéza polyfluoralkylovaných a polyfluorpolyoxaalkylovaných aminů

Autor: Viola Kolaříková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Dusíkaté heterocykly (NHC ligandy) jsou potenciálně využitelné jako součást katalyzátorů nejrůznějších reakcí, např. Grubbových a Hoveydoových-Grubbových katalyzátorů pro metateze alkenů. Tato práce se zabývá syntézou polyfluoralkylovaných a polyfluorpolyoxaalkylovaných iminů a aminů jako prekurzorů pro tyto ligandy.

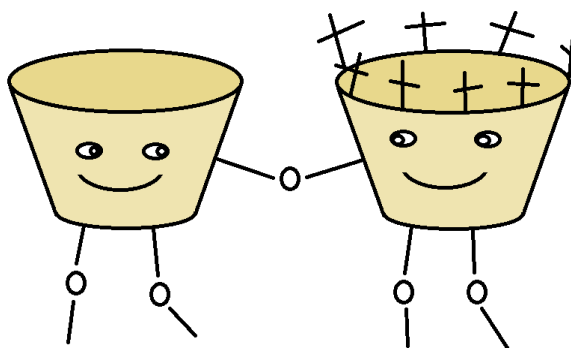
Při syntéze jsem vyšla z polyfluor- a polyfluorpolyoxakarboxylových kyselin, které jsem reakcí s Grignardovým činidlem převedla na směsi ketonů a terciárních alkoholů. Získané ketony jsem následně reagovala s benzylaminem za vzniku příslušných iminů. Jejich izomerizací v přítomnosti triethylaminu jsem připravila benzylidenaminy, jejichž deprotektací jsem získala příslušné primární aminy se sekundárními alkylovými řetězci.



Substituce calix[n]arenů na jednom methylenovém můstku

Autor: Pavel Hozák
 Ročník: B2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

V naší práci se zabýváme přípravou peralkylovaných calix[n]arenů na spodním okraji a jejich následnou hydroxylací na jednom methylenovém můstku pomocí radikálové bromace a následné hydrolýzy vzniklé sloučeniny. Tyto látky jsou vhodnými intermediáty pro přípravu monofunkcionalizovaných calix[n]arenů na jednom můstku. Zatím byly připraveny deriváty monohydroxycalix[6]arenu a monohydroxycalix[8]arenu. Je známo, že calix[5-8]areny ve své původní formě vykazují komplexační vlastnosti vůči fullerénům C_{60} a C_{70} . Domníváme se, že substitucí jednoho můstku se tyto jejich vlastnosti nezmění, a tak bychom je chtěli použít na přípravu stacionárních fází do HPLC kolon pro separaci směsí fullerénů a syntézu calix[n]arenových oligomerů.

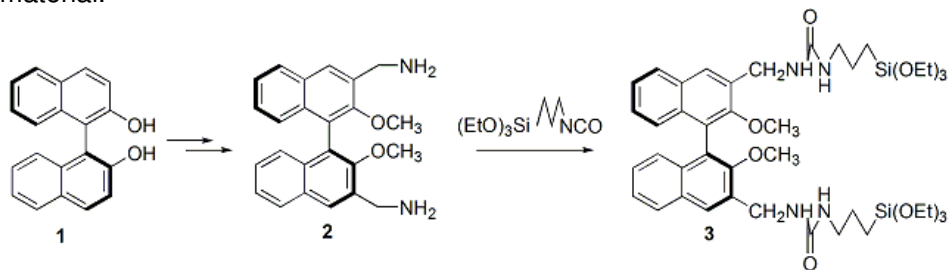


Syntéza derivátů 1,1'-binaftalen-2,2'-diolu jako prekurzorů pro přípravu chirálních hybridních organicko-anorganických materiálů

Autor: Julie Vavryčuková
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

Hybridní organicko-anorganické materiály jsou látky, které spojují fyzikální vlastnosti anorganické složky se specifickými vlastnostmi organických molekul. Jedním z možných směrů využití takových materiálů je heterogenní katalýza. Cílem našeho projektu je příprava hybridních materiálů, které budou následně testovány jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí.

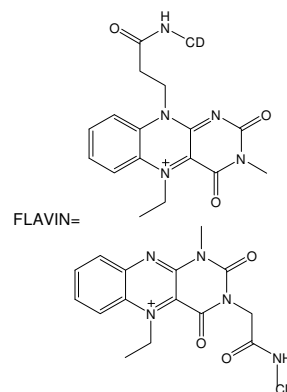
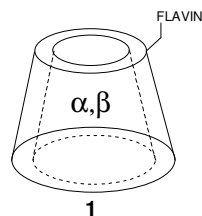
Předmětem mé práce je příprava enantiomerně čistého organického prekurzoru (**2**) pětistupňovou syntetickou cestou z (*S*)-1,1'-binaftalen-2,2'-diolu (**1**) a jeho následné převedení na organický bis(triethoxysilan) (**3**), ze kterého je možné pomocí sol-gel techniky získat chirální hybridní materiál.



Konjugáty flavinu a cyklodextrinu - syntéza a studium katalytické účinnosti při stereoselektivních oxidacích

Autor: Tomáš Hartman
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Cyklodextrinové konjugáty se ukazují jako účinné katalyzátory enantioselektivních oxidací sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku. Předmětem práce je syntéza nových strukturně modifikovaných konjugátů α - a β -cyklodextrinu s alloxaziny a isoalloxaziny (viz schéma) s cílem hledání vztahu struktura versus katalytická aktivita u této třídy katalyzátorů. Připravené konjugáty jsou testovány při oxidacích modelových substrátů - alifatických i aromatických sulfidů.

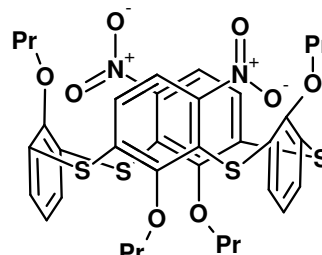
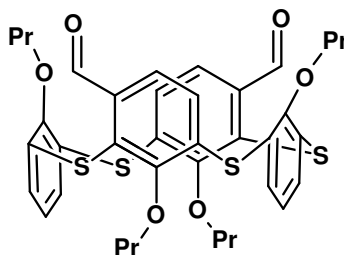


Rezoluce inherentně chirálních derivátů thiacalix[4]arenu

Autor: Jan Lukášek
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Thiacalixareny jsou heterocyklické sloučeniny, které byly poprvé připraveny v roce 1997. Přítomnost čtyř sirných můstků způsobuje zcela odlišné rozložení elektronové hustoty ve srovnání s klasickými calixareny. Kromě běžných vlastností calixarenů, jako je např. vynikající komplexační chování, přináší nové možnosti derivatizace základního skeletu, a proto jsou thiacalixareny vhodnými kandidáty pro další využití v supramolekulární chemii.

Formylace a nitrace tetrapropoxyderivátu thiacalix[4]arenu imobilizovaného v 1,3-střídavé konformaci poskytují mimo jiné inherentně chirální deriváty. Tato práce se zabývá přípravou těchto látek ve větším měřítku a separací takto vzniklých enantiomerů, a to jejich převedením na diastereoizomery pomocí vhodných reverzibilních reakcí.

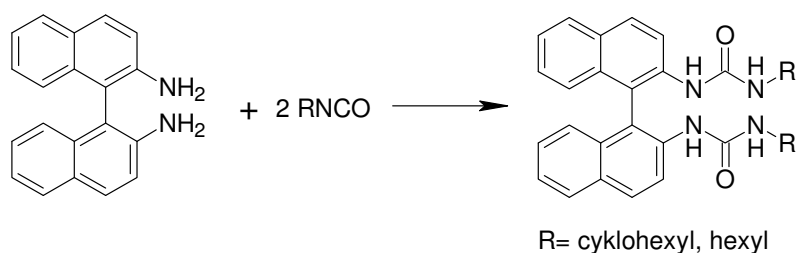


Sekce : Organická chemie B2

Příprava a separace chirálních sulfoxidů

Autor: Michal März
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Holakovský, Ph.D.

Sulfoxidy patří mezi biologicky aktivní látky a některé z nich jsou využívány jako léčiva. Mezi sulfoxidy patří například prazoly, které se používají jako antiulceróza. Z nich například omeprazol je používán v enantiomerně čisté formě jako esomeprazol. Na rozdíl od problematiky komplexací aniontů je komplexaci sulfoxidů věnováno v odborné literatuře minimální pozornost. Cílem práce je příprava různých strukturních typů binaftalenových močovín, které by se mohly používat pro stereoselektivní komplexace sulfoxidů. Tyto močoviny jsou vyráběny z 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu a příslušného isokyanátu.



Sekce : Výroba léčiv I

Vývoj analytickej metódy pre stanovovanie biomarkerov oxidatívneho stresu

Autor: Michaela Gajdošová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technológie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Kamila Syslová

Oxidatívny stres spôsobuje oxidáciu základných stavebných jednotiek bunky (napr. proteíny, nukleové kyseliny, fosfolipidy), vyvolávajúcu patologické zmeny, až bunkovú smrť, následkom ktorej nastáva poškodenie tkanív a rozvoj ochorenia. Pôsobením kyslíkových reaktívnych častíc (ROS) sa zvyšuje hladina *o*-tyrozínu, 3-nitrotyrozínu a 3-chlórtirozínu, biomarkerov poškodenia proteínov v telesných tekutinách (plazma, moč, kondenzát vydychovaného vzduchu, atd.). Prostredníctvom monitorovania hladín týchto látok v telesných tekutinách získavame vhodný nástroj medicínskej diagnostiky pre včasné odhalenie ochorení spájaných s oxidatívnym stresom (Alzheimerova choroba, silikóza, asbestóza).

Predmetom prezentovanej práce je vývoj analytickej metódy pre monitorovanie hladín *o*-tyrozínu, 3-nitrotyrozínu a 3-chlórtirozínu v telesných tekutinách. Princíp vyvinutej metódy spočíva v kombinácii derivatizačnej reakcie a presnej a citlivej analytickej metódy na báze kvapalinovej chromatografie spojenej s MS detekciou. Súčasťou práce je nielen optimalizácia podmienok derivatizácie, separácie a detekcie, ale aj validácia metódy. Vyvinutá metóda sa dá charakterizovať nízkym limitom detekcie a kvantifikácie. Nedielnou súčasťou práce je klinická štúdia, ktorej úlohou bolo overenie použiteľnosti vyvinutej metódy v praxi.

Sekce : Výroba léčiv I

Příprava a využití 1,2-epoxyindanu

Autor: Bc. Lucie Hladová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Martina Štekrová

Téma práce vychází z požadavku společnosti Unipetrol, a.s. nalézt ekonomicky zajímavé využití indenu, jednoho z uhlovodíků obsažených v pyrolýzních kondenzátech, vedlejších produktech při výrobě olefinů. Práce je zaměřena na epoxidaci indenu na 1,2-epoxyindan a jeho následné využití pro přípravu *cis*-1-aminoindan-2-olu. Opticky aktivní aminoindanoly jsou výchozími látkami pro syntézu některých léčiv a agrochemikálií a používají se jako chirální ligandy katalyzátorů při syntézách mnohých stereospecifických látek. Inden byl epoxidován pomocí peroxidu vodíku (vodný roztok či jeho adukt s močovinou - UHP) v sérii experimentů za použití různých rozpouštědel, za laboratorní teploty a atmosférického tlaku. Použitým katalyzátorem bylo methyltrioxorhenium, použitými aditivami 3-methylpyrazol a 1-methylimidazol. Nejvyšší výtěžky 1,2-epoxyindanu byly získány reakcí indenu s UHP v dichlormethanu. Nejvyšší dosažený výtěžek 1,2-epoxyindanu byl za těchto reakčních podmínek 93,4 % při 96% konverzi indenu po 5,5 h. Následující experimenty budou zahrnovat izolaci 1,2-epoxyindanu od zbytku reakční směsi vakuovou destilací a jeho následnou reakci s nitrilem a sulfokyselinou za vzniku oxazolinu, jehož hydrolýzou vzniká *cis*-1-aminoindan-2-ol.

Sekce : Výroba léčiv I

Vliv reakční doby na stupeň přiblížení k rovnováze reakce hydroxidu sodného s methanolem

Autor: Bc. Kateřina Hnátková
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Výroba methanolátu sodného je založena na vratné reakci hydroxidu sodného s methanolem. Tato reakce má velmi nízkou rovnovážnou konstantu $K = 0,24$. Složení reakční směsi je možno upravovat odstraňováním vody, která při reakci vzniká.

Rychlost jakou reakční směs dospívá do chemické rovnováhy za teploty varu je vysoká. Měřitelná může být za nižších teplot. Pro účely měření reakční rychlosti byla sestavena průtočná aparatura s reaktorem vybaveným statickým mísičem, umožňující měření reakční rychlosti velmi rychlých reakcí.

V této práci byly ověřovány analytické postupy stanovení koncentrace složek reakční směsi a bylo stanoveno složení reakční směsi v rovnovážném stavu. Dále byl studován vliv reakční doby a teploty na stupeň přiblížení k rovnováze. Při teplotě 20 °C bylo za čas 57 s dosaženo rovnováhy ze 70 %, při teplotě 40 °C a stejném čase se složení reakční směsi přiblížilo rovnováze z 80 %.

Sekce : Výroba léčiv I

Výzkum a vývoj analogů pikoplatiny, cytostatik IV. generace

Autor: Michaela Hrdá
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je orientována do oblasti přípravy analogů platinových komplexů s cytostatickou aktivitou. Velmi nadějnou sloučeninou z hlediska terapeutického využití a zároveň komplexem překonávajícím rezistenci nádorových buněk na cisplatinu je *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)Cl₂], označovaný jako pikoplatina. Jednou z nevýhod platinových komplexů je jejich nízká rozpustnost ve vodě, což znamená komplikaci při jejich terapeutickém používání. Cílem této práce bylo hledání nových analogů pikoplatiny, které by potenciálně vykazovaly vysokou účinnost a ideálně vysokou vodorozpustnost. Byly navrženy tři nové platinové komplexy, které v literatuře nebyly dosud popsány (absence CAS RN): *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)F₂], *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)Br₂] a *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)I₂]. Pozornost byla zaměřena na přípravu těchto nových látek ve vysoké čistotě a na vývoj analytických metod pro jejich charakterizaci založených na HPLC s UV/Vis detekcí, HPLC s hmotnostně spektrometrickou (MS) detekcí, přičemž vlastní separace je realizována na iontoměničové stacionární fázi, a rentgenové fluorescenci (XRF). Připravená analoga pikoplatiny byla dále podrobena testům na cytotoxickou aktivitu, tzv. XTT cytotoxicitní testy na buněčných liniích CaCo-2 (buňky epiteliálního kolorektálního adenokarcinomu) a MCF-7 (buňky karcinomu prsu).

Sekce : Výroba léčiv I

Vývoj metody stanovení OPA (o-phthalaldehyd) v přípravku Ajatin plus extra strong

Autor: Bc. Monika Kymlová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámstný Ph.D.

Desinfekční prostředek *Ajatin plus extra strong* se používá k desinfekci chirurgických nástrojů. Jeho hlavními složkami jsou BKC (benz(alkyl)dimethylamonium chloridy, bromidy nebo hydroxidy), OPA (*ortho*-phthalaldehyd) a inhibitor koroze na bázi benzotriazolu. Cílem práce bylo vyvinout metodu stanovení obsahu OPA pro provozní nasazení, schopnou detekovat snížení koncentrace pod hodnotu 0,3 %. S ohledem na to je využití metod HPLC a GC-MS příliš nákladné. Proto byla snaha o vývoj metody spektrofotometrického stanovení.

Nejprve byla provedena spektrofotometrická analýza hlavních složek přípravku, přičemž bylo zjištěno, že absorpční pásy jednotlivých látek se překrývají a proto lze přímou spektrofotometrií dosáhnout pouze orientačního stanovení. Pro přesnější stanovení byly zkoumány derivatizační metody. Derivatizace siřičitanem sodným v bazickém prostředí se projevila jako nevhodná, z důvodu nelineární odezvy. Derivatizace NACC (N-Acetylcystein) v přítomnosti činidla s aminoskupinou však vedla ke kvantitativní tvorbě substituovaných derivátů isoindolu, což vede k řádovému zvýšení citlivosti a selektivity metody vůči OPA. Další vývoj v této oblasti bude zaměřen na vývoj detekčního proužku pro umožnění rychlého stanovení přímo v místě aplikace lázně.

Sekce : Výroba léčiv I

Optimalizace tokových a segregčních charakteristik tabletoviny úpravou granulometrie excipientů

Autor: Bc. Diana Majerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámostný, PhD.

Práce je zaměřena optimalizaci složení směsi pro přímé lisování tablet přípravku A (Zentiva). Zmíněná tabletovina vykazuje špatné tokové charakteristiky, což vede k horší hmotnostní stejnoměrnosti lisovaných tablet a dalším procesním obtížím. Majoritní složkou stávající tabletoviny je dihydrát hydrogenfosforečnanu vápenatého, používaný jako plnivo, který je kvůli malé střední velikosti částic příčinou špatných tokových vlastností tabletoviny. Cílem této práce proto bylo upravit složení tabletoviny částečnou či úplnou záměnou stávajícího excipientu za tentýž s hrubším zrnem tak, aby se tokové vlastnosti zlepšily. Tato záměna však může být doprovázena zhoršením segregčních charakteristik s následným negativním vlivem na homogenitu tabletoviny. Proto byly vyrobeny šarže tabletoviny léčivého přípravku A s různým poměrem stávajícího excipientu a excipientu s hrubším zrnem. Byly změřeny tokové charakteristiky jednotlivých excipientů a tabletovin, a dále homogenita tabletovin a jejich segregční indexy. Z tabletovin dále byly připraveny tablety, u kterých byly experimentálně ověřeny jejich základní parametry a analyzována stejnoměrnost obsahu API. Ačkoliv experimenty dále pokračují ukazuje se, že tabletovin s částečně nahrazeným excipientem vykazují lepší kombinaci segregčních a tokových charakteristik, než má původní složení.

Sekce : Výroba léčiv I

Vývoj dekontaminační metody pro degradaci platinových cytostatik pomocí par peroxidu vodíku

Autor: Bc. Michal Makalouš
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Cílem práce bylo studium dekontaminačního procesu, využívajícího jako účinné agens páry peroxidu vodíku (VPHP - Vapor Phase Hydrogen Peroxide), jako možnou metodu pro degradaci platinových cytostatik. Platinová cytostatika představují vážnou hrozbu pro životní prostředí i v malých množstvích. Jejich koncentrace v odpadních vodách, především z lékařských zařízení, stále stoupá, a proto se zvyšují požadavky na jejich účinnou degradaci. Předpokládá se využití této metody například pro dekontaminaci lékařských přístrojů, nástrojů a prostor, ve kterých se platinová cytostatika používají. Pro tuto konkrétní práci byla pro prvotní měření použita modelová látka TCAP (trichloroamminplatnatan draselný). Během série pokusů byl studován vliv koncentrace par peroxidu vodíku a potenciace jejich účinků pomocí pyridinu, UV záření a jejich kombinace na rychlost degradace této modelové látky. Pro tuto studii byla vyvinuta analytická metoda využívající HPLC a HPLC/MS. Byl stanoven časový průběh degradace modelové látky a identifikovány struktury degradačních produktů. Poznatky, získané při degradaci TCAP, budou dále aplikovány pro studium dekontaminace konkrétních platinových cytostatik.

Sekce : Výroba léčiv I

Využití katalyzátorů hydrotalcitového typu

Autor: Lucie Makovcová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá aldolovou kondenzací 4-*tert*-butylbenzaldehydu s propanalem a následnou hydrogenací C-C dvojně vazby 4-*tert*-butyl- α -methylcinnamaldehydu. Takto připravený 4-*tert*-butyl- α -methylhydrocinnamaldehyd známý též pod komerčním názvem Lilial je látka se sladkou a osvěžující květinovou vůní, která nachází uplatnění v parfumářském průmyslu. Obvykle se vyrábí kondenzací zmíněných substrátů homogenně katalyzovanou alkalickými hydroxidy v methanolu s následnou hydrogenací nenasyceného aldehydu. Těžiště této práce spočívá v přípravě Lilialu za využití heterogenních katalyzátorů na bázi hydrotalcitů, snadno separovatelných z reakční směsi, které budou následně modifikovány hydrogenační složkou (Pd) pro zjednodušení dvoustupňové přípravy do tzv. „one – pot“ syntézy. V první fázi této práce byly optimalizovány reakční podmínky aldolové kondenzace katalyzované nemodifikovaným hydrotalcitem s ohledem na reakční podmínky následné hydrogenace C-C dvojně vazby. Byl optimalizován molární poměr výchozích látek a teplota. Následně budou hydrotalcity modifikovány hydrogenační složkou, budou optimalizovány reakční podmínky „one-pot“ syntézy a hledán vhodný molární poměr Mg/Al použitého hydrotalcitu.

Sekce : Výroba léčiv I

Léčivý přípravek Endiex – validace dekontaminačního procesu

Autor: Bc. Kateřina Punčochová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Práce je zaměřena na vývoj dekontaminačního procesu pro výrobu léčivého přípravku Endiex. V důsledku vlastností účinné látky Nifuroxazid (žlutá prachová surovina, velmi malá velikost částic a nerozpustnost ve vodě) dochází během výroby přípravku na povrchu zařízení k tvorbě souvislé, hladké, velmi obtížně čistitelné krusty, jejíž odstranění běžnými prostředky je značně komplikované. Proto byly navrženy 4 alternativní dekontaminační postupy s využitím komerčně dostupného bazického detergentu Deconex SURFACE AF, roztoku NaOH, roztoku Na₂CO₃ a roztoku běžného mycího detergentu. Tyto postupy byly aplikovány v laboratorních podmínkách v procesu simulovaného mytí modelově znečištěného zařízení. Zbytková kontaminace povrchu zařízení po simulovaném mytí byla hodnocena stěrovou metodou s následnou analýzou HPLC. Z výsledků testů vyplývá pořadí dekontaminačních schopností v řadě Deconex > NaOH > Na₂CO₃ > tenzid. Čistící schopnost NaOH se při použití ve směsi s laurylsulfátem sodným zvýšila až na úroveň přípravku Deconex. Pro provozní aplikaci se zdá být nejvhodnější použití detergentu Deconex nebo kombinace NaOH/surfaktant, kterými bylo možno dosáhnout zbytkové kontaminace v řádu jednotek $\mu\text{g} \cdot \text{dm}^{-2}$.

Sekce : Výroba léčiv I

Selektivní fotokatalytická derivatizace anilinu

Autor: Bc. David Stíbal
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Dr. Jacinto Sá.; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Proces fotokatalýzy byl původně pro svou nízkou selektivitu používán především při dekontaminacích, nicméně v posledním desetiletí stále častěji nachází využití i v selektivních organických reakcích. V návaznosti na předchozí studie užití TiO_2 při redukčních reakcích nitrobenzenu se v předkládané studii zabýváme N-alkylacemi anilinu. Produkty reakce mají široké využití např. v barvářském nebo zemědělském průmyslu. Oxid titaničitý s dobře dispergovanými nanočásticemi zlata (nanesenými metodou DPU – Deposition Precipitation with Urea) byl použit k reakci anilinu s terminálními alkoholy s různou délkou řetězce. Reakční mechanismus zahrnuje fotokatalytickou oxidaci alkoholu na aldehyd pomocí částic TiO_2 , nukleofilní adici anilinu na C=O vazbu aldehydu a následnou hydrogenaci vzniklé C=N vazby pomocí nanočástic zlata. Touto one-pot reakcí jsme kombinací fotokatalytických vlastností TiO_2 a hydrogenačních vlastností nanočástic úspěšně připravili různé N-alkylované aniliny za mírných podmínek a s vysokou selektivitou. Charakterizace katalyzátoru a mechanismus vzniku produktů jsou v příspěvku prezentovány. Práce poukazuje na možné využití vysoce ekologických fotokatalytických procesů při organické syntéze složitějších molekul. Výsledky nabízejí velký potenciál k výzkumu dalších reakcí, navazujících na současné výsledky.

Sekce : Výroba léčiv II

Příprava skořicového alkoholu redukcí skořicového aldehydu

Autor: Bc. Natálie Baronová
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Potucká, Ph.D., Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Skořicový alkohol, neboli cinnamyl alkohol, je velmi žádaná vonná látka, která je běžnou součástí kosmetických přípravků. Vyrábí se redukcí běžně dostupného skořicového aldehydu. Tento alkohol lze připravit selektivní hydrogenací karbonylové skupiny na kovových katalyzátorech jako jsou platina nebo katalyzátory na bázi Ru-Sn. Tato metoda je spolehlivá, avšak vysoká cena katalyzátorů není pro průmysl příliš vhodná. Další možností přípravy je Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce v přítomnosti alkoholu.

V této práci byla blíže studována příprava skořicového alkoholu právě pomocí Meerweinovy-Ponndorfovy-Verleyovy redukce skořicového aldehydu v přítomnosti alkoxydů kovů. Katalyzátory pro tuto redukci mohou být homogenní nebo heterogenní. Jako homogenní katalyzátory byly použity aluminiumisopropoxid a zirkoniumpropoxid. Reakce byla prováděna v propan-2-olu, který sloužil jako donor vodíku. Jako heterogenní katalyzátor byla testována kysele aktivovaná alumina, její možnost regenerace a opětovné použití.

V budoucnu budou studovány ještě další heterogenní katalyzátory, zejména alumosilikáty a imobilizované alkoxydy.

Aminokarbenový mechanismus vzniku terciárních aminů hydrogenací nitrilů na palladiovém katalyzátoru

Autor: Bc. Jakub Dražanský
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Krupka, Ph.D.

Tato práce se zabývá experimentální studií reakčního mechanismu heterogenně katalyzované hydrogenace nitrilů. Přestože je chemismus této průmyslově významné hydrogenace dobře znám, detailní mechanismus reakcí probíhajících na povrchu hydrogenačního katalyzátoru je stále ještě předmětem spekulací.

Byly studovány hydrogenace nitrilů, jejichž molekuly neobsahují vodíkové atomy na α -uhlíku vzhledem k nitrilové skupině. Hydrogenace byly vedeny v kapalně fázi na Pd-katalyzátoru při reakčních teplotách 80-110°C a tlaku vodíku 3-5MPa. Při hydrogenaci trimethylacetonitrilu v přítomnosti nižších alifatických dialkylaminů (např. diethylaminu) byl pozorován vznik smíšeného aminu: neopentylalkylaminu. Podle enaminové teorie vzniku terciárních aminů však tato látka nemůže vznikat, jelikož od ní nelze odvodit příslušný enamin s dvojnou vazbou na straně neopentylového řetězce. Provedené experimenty rovněž ukázaly, že za vznik neopentylalkylaminu nejsou zodpovědné disproporcionační reakce přítomných aminů.

Tato experimentální fakta jsou tak nepřímým důkazem svědčícím o správnosti nedávno publikované hypotézy aminokarbenového mechanismu vzniku sekundárních a terciárních aminů.

Vliv vlastností kukuřičného škrobu na rychlost uvolňování léčivé látky

Autor: Pavel Jakubík
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Cílem práce bylo určit vliv vlastností škrobů na disoluční profil modelové účinné látky a vytvořit matematický model uvolňování účinné látky do objemu disolučního média

K měření rychlosti rozpouštění léčivé látky byla zvolena metoda pravé disoluce. Postupně byly změřeny disoluční profily kofeinu za použití 5 různých škrobů jako excipientů v poměru kofein : škrob (4:1). Dále byla změřena bobtnavost škrobu jako nejsnáze určitelná vlastnost, která ovlivňuje rychlost disoluce.

Výsledkem byly jednotlivé disoluční profily škrobů a matematický model sestávající z rovnice pro změnu koncentrace kofeinu v čase a pro změnu tloušťky škrobové vrstvy v čase. Pro všechny škroby byly odhadnuty hodnoty parametrů modelu rozpouštění - rychlost rozpouštění kofeinu, difuzivita kofeinu ve škrobové vrstvě a rychlost rozpouštění škrobové vrstvy. Bylo zjištěno, že difuzivita kofeinu úzce souvisí s bobtnavostí konkrétního použitého škrobu.

Sekce : Výroba léčiv II

Studium přeměny různých forem laktózy pomocí IGC

Autor: Dušan Litva
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Laktóza je z hlediska farmaceutického průmyslu nejrozšířenější excipient, který se vďakaa své nízké reaktivity používá při formulaci většiny pevných léčivých forem. Preto je důležité z hlediska stability přípravku zachování jej chemických a fyzikálních vlastností po celou dobu existence přípravku. Pro charakteristiku laktózy je vhodná metoda inverzní plynové chromatografie, která umožňuje měření hodnot některých komplikovaně měřitelných veličin farmaceutických materiálů jako například povrchové energie prášků, kyselých a zásadických a polárních vlastností povrchů. Tyto vlastnosti následně ovlivňují chování a technologické zpracování materiálů.

Cílem práce bylo zkoumat kyselá-zásadická změny, tokové vlastnosti a mutarotační přeměny anomérů laktózy vlivem zvýšené vzdušné vlhkosti pro dvě technologicky různými postupy vyrobené laktózy. Ukázalo se, že zvýšená vzdušná vlhkost má zásadní vliv na uvedené vlastnosti, především však na změnu elektron-donorových a elektron-akceptorových vlastností centrálního povrchu, jako pro amorfni tak i pro krystalickou formu laktózy. To může způsobovat zásadní problém při formulaci s léčivem výrazně kyselého nebo zásadického charakteru, kde zvýšení vzájemných interakcí s laktózou může vést k snížení jeho účinnosti.

Sekce : Výroba léčiv II

Testování aktivity Ra – Ni katalyzátorů

Autor: Bc. Helena Milinovičová
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Tato práce vznikla ve spolupráci s německou firmou Süd-Chemie a je zaměřena na testování aktivity Ra – Ni katalyzátorů různých výrobců. Raneyovy niklové katalyzátory nacházejí hojně využití při mnoha průmyslových procesech a organických syntézách, zejména pak při hydrogenacích. Daná práce se zabývá hydrogenací modelových substrátů, β – fenylethanolu a kuminaldehydu, optimalizací reakčních podmínek při hydrogenaci kuminaldehydu a studiem vlivu stáří a skladovacích podmínek Ra – Ni katalyzátorů na jejich aktivitu při hydrogenaci skořicového aldehydu. Na základě získaných kinetických dat byla porovnávána aktivita katalyzátorů firmy Catalloy a Evonik Degussa, u katalyzátorů firmy Sinopec byl sledován vliv stáří a skladovacích podmínek na jejich aktivitu.

Sekce : Výroba léčiv II

Příprava platinových sloučenin s 1*R*,2*R*-diamincyklohexanovým ligandem jako prekurzorů moderních cytostatik

Autor: Bc. Iva Nováková
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jitka Holakovská, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je orientována do oblasti přípravy platinových komplexů s 1*R*,2*R*-diamincyklohexanovým ligandem (DACH). Sloučeniny tohoto typu jsou používány jako výchozí látky při výrobě cytostatik 4. generace, například oxaliplatiny nebo komplexu AP5346. Nevýhodou současně používaných výchozích látek DACHPtCl₂ a DACHPtI₂ je jejich velice nízká rozpustnost ve vodě, která nepřesahuje 0,3 g/L, což značně komplikuje jejich využití ve farmaceutické výrobě. Práce je zaměřena na přípravu komplexů s DACH nosičovým ligandem a variabilními odstupujícími ligandy, které mají vyšší rozpustnost ve vodě. Výchozí látkou při přípravě těchto látek byl komerčně dostupný DACHPtCl₂, který reakcí se stříbrnou solí poskytuje požadovaný platinový komplex. Byly připraveny komplexy DACHPt(dimethansulfonát), DACHPt(ditoluensulfonát), DACHPtBr₂ a DACHPtF₂ jako látky s potenciální možností jejich využití v průmyslové praxi. Připravené struktury byly charakterizovány vybranými analytickými metodami (rentgenová difrakce (XRD), hmotnostní spektrometrie (MS)). U látek DACHPtF₂, DACHPt(dimethansulfonát), DACHPt(ditoluensulfonát) byla testována i jejich biologická aktivita provedením XTT testů, které stanovili jejich cytotoxickou aktivitu u vybraných buněčných kultur.

Sekce : Výroba léčiv II

Modifikace podmínek při tabletování farmaceutických substancí

Autor: Ondřej Řezníček
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Jednou z nejrozšířenějších formulací léčiv jsou tablety. Jejich výroba je pečlivě sledována a musí splňovat přísná kritéria. Tato práce se zabývá částí procesu výroby tablet a to samotným procesem tabletování. Zabývá se faktory, které ovlivňují důležité parametry konečné lékové formy a to zejména rozpouštěcí rychlost a pevnost.

V experimentální části práce byly připraveny směsi celulózy a dvou účinných látek (paracetamolu a kofeinu), přičemž kofein byl použit ve 3 různých modifikacích (prachový, granulát, briketáž). Připravené směsi byly tabletovány na ručním lisu na tablety při různých tabletovacích silách a cílem práce bylo zjistit, jaké mají připravené tablety disoluční profily a jak jsou tyto rozpouštěcí profily ovlivněny tabletovací silou, která byla použita k vyhlazení tablety, a formou kofeinu, použitého v dané tabletě. Disoluční testy byly provedeny pádélkovou metodou dle Českého lékopisu a pro stanovení obsahu účinných látek byla vypracována analytická metoda stanovení pomocí kapalinové chromatografie. Dále byly tablety testovány na pevnostroji, což umožnilo nalézt souvislost mezi pevností a použitou formou kofeinu. Získané výsledky mohou být použity pro optimalizaci tabletovacích tlaků a výběru vhodné formy účinné látky při výrobě.

Sekce : Výroba léčiv II

Příprava a využití bifunkčních katalyzátorů na bázi hydrotalcitů

Autor: Lenka Tůmová
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D., Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Aldolovou kondenzací benzaldehydu s acetonem vzniká benzylidenaceton, jehož následnou hydrogenací je získán benzylaceton, který se využívá v parfumářském průmyslu. Při průmyslové výrobě se jako nejčastější způsob katalýzy aldolové kondenzace používá roztok hydroxidu sodného. To má ale své nevýhody jako například problémové odstraňování hydroxidu z produktu. Cílem této práce bylo připravit benzylaceton na heterogenních katalyzátorech hydrotalcitového typu, snadno separovatelných z reakční směsi a zároveň tyto katalyzátory modifikovat hydrogenační složkou a přípravu benzylacetonu tak zjednodušit do tzv. „one-pot“ reakce. Studovaná reakce byla katalyzována hydrotalcity modifikovanými palladiem. Dále byl studován vliv poměru Mg/Al v hydrotalcitu, vliv teploty a reakčního uspořádání na průběh reakce.

Sekce : Výroba léčiv II

Kondenzace benzaldehydu s acetanhydridem katalyzovaná modifikovanými molekulovými sítí

Autor: Bc. Eva Vrbková
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Kondenzační reakce, které se velmi často používají při přípravě chemických specialit, mohou být katalyzovány kyselými i bazickými katalyzátory jak v homogenním, tak v heterogenním uspořádání reakce. Výhodou heterogenní katalýzy je především snadná separace katalyzátoru z reakční směsi a možnost opětovného použití.

Heterogenně katalyzovaná reakce benzaldehydu s acetanhydridem může poskytnout poměrně širokou škálu produktů. Mezi žádané produkty diskutované kondenzace patří *benzaldehyd diacetát*, nejčastěji zastoupeným nežádoucím produktem v reakční směsi je kyselina benzoová. Předkládaná práce popisuje vliv reakčních podmínek (teploty, poměru reakčních složek, rozpouštědla a druhu katalyzátoru) na složení výsledné reakční směsi. Nejlepších výsledků, 98 % selektivity k diacetátu benzaldehydu při 98,5 % konverzi benzaldehydu, bylo dosaženo při použití kyselého katalyzátoru (MCM-41 modifikovaného -COOH skupinami), rozpouštědla heptanu a teploty 40 °C. Výtěžek izolovaného produktu byl v tomto případě 92 %.

Sekce : Organická technologie

Bifunkční katalyzátory pro syntézu benzylacetonu

Autor: Dana Bílková
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Sarah Becharová

Předkládaná práce je zaměřena na využití katalytických vlastností bifunkčních katalyzátorů pro „one-pot“ syntézu benzylacetonu. V průmyslu je tato komerčně žádaná vonná látka vyráběna dvoustupňově - aldolovou kondenzací benzaldehydu s acetonem s použitím kondenzačního katalyzátoru a následnou hydrogenací benzylidenacetonu, produktu prvního kroku výroby, s použitím kovového nosičového katalyzátoru. Těžiště této práce spočívá v řešení úspornějšího procesu syntézy benzylacetonu „one-pot“ syntézou za přítomnosti připravených bifunkčních katalyzátorů.

Pro sérii experimentů byly mokrou impregnací zeolitů připraveny bifunkční katalyzátory 5% Pd/USY, 5 % Pd/HY a 2 % Pd/USY s centrem acido-bazickým i hydrogenačním a byla provedena „one-pot“ syntéza benzylacetonu, za přítomnosti vhodného bifunkčního katalyzátoru. Bylo zjištěno, že bifunkční katalyzátory připravené v této práci katalyzují za zvolených reakčních podmínek (teplota 60 °C a tlak 1 MPa, 2 MPa, 5 MPa) přeměnu benzaldehydu na toluen přes benzylalkohol. Pro potlačení této vedlejší reakce je třeba vyzkoušet například následující změnu podmínek: snížení poměru palladium/zeolit, snížení či zvýšení celkového množství bifunkčního katalyzátoru vzhledem k benzaldehydu, snížení či zvýšení tlaku vodíku v reaktoru.

Sekce : Organická technologie

Analýza průmyslového procesu parciální oxidace uhlovodíků

Autor: Luděk Boháček
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., doc. Ing. Tomáš Herink, Ph.D.

Parciální oxidace uhlovodíků (POX) je proces, při kterém se z ropných frakcí jako je visbreakingový zbytek, vakuové zbytky či černý destilát vyrábí syntézní plyn (směs oxidu uhelnatého a vodíku). Jedná se o zplyňování suroviny v přítomnosti kyslíku a vodní páry za vysoké teploty a zvýšeného tlaku. Během procesu vznikají také vedlejší produkty, zejména saze, methan, sulfan a kyanidy. Na výrobně POX v Unipetrolu Litvínov se z části vzniklých sazí vyrábí granulované saze s obchodním názvem CHEZACARB, využitelné např. jako sorbenty nebo kompozity.

Cílem práce bylo zpracovat data z provozního monitoringu dvou vybraných reaktorů, analyzovat podrobně režimy reaktorů a zhodnotit závislost výtěžků produktů oxidace na základních procesních parametrech. Zkoumány byly výtěžky methanu, sazí, oxidu uhelnatého a vodíku v závislosti na poměru kyslík/surovina a poměru pára/surovina. Součástí práce byla i analýza časových řad všech sledovaných veličin. Provoz reaktorů byl hodnocen především na základě výsledků shlukové a korelační analýzy.

Sekce : Organická technologie

Příprava Lilialu

Autor: Alžběta Frýbortová

Ročník: M2

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc., Ing. Sarah Becharová

Předkládaná práce vznikla ve spolupráci s firmou Aroma a.s. Zaměřuje se na přípravu Lilialu, který je vyhledávanou látkou v kosmetickém průmyslu při výrobě mýdel a parfémů. Vyznačuje se výraznou vůní lilie, magnolie, šeríku či cypřiše. Syntéza se skládá ze dvou kroků, aldolové kondenzace *p-terc*-butylbenzaldehydu s propanalem a následné hydrogenace vzniklé C-C dvojné vazby. Aldolovou kondenzací je získán *p-terc*-butyl- α -methylskořicový aldehyd, který je ve druhém kroku hydrogenován na výsledný produkt *p-terc*-butyl- α -methylhydroskořicový aldehyd, Lilial. Cílem této práce je optimalizovat reakční podmínky prvního kroku syntézy tak, aby byly vhodné pro využití ve stávajícím technologickém zařízení.

Sekce : Organická technologie

Syntéza ethylformiátu karbonylací ethanolu

Autor: Josef Jadrný

Ročník: M1

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Miroslav Petrisko, CSc.

Estery kyseliny mravenčí se nejčastěji využívají jako meziprodukty při syntéze dalších organických látek, např. kyseliny octové, kyseliny mravenčí, formaldehydu nebo DMC (dimethyl carbonate). Estery kyseliny mravenčí se minoritně uplatňují jako vonné látky.

Dnes se převážná většina esterů kyseliny mravenčí vyrábí karbonylací methanolu za přítomnosti alkoholátu jako katalyzátoru. Methylformiátu se touto metodou připraví 135 mil kg ročně.

Práce je zaměřena na přípravu ethyl esteru kyseliny mravenčí karbonylací ethanolu v přítomnosti ethanolátu draselném jako katalyzátoru. Byla studována rovnováha karbonylace a její kinetika. Ze získaných dat byla vyhodnocena reakční entalpie, rovnovážné konstanty, aktivační energie a rychlostní konstanty.

Součástí práce bylo určení azeotropického bodu směsi ethanol – ethyl formiát.

Sekce : Organická technologie

Syntéza anilinu hydrogenací nitrobenzenu v kapalné fázi

Autor: Jiří Mrázek
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Miroslav Petrisko, CSc.

Největší množství anilinu se dnes vyrábí katalytickou hydrogenací nitrobenzenu v plynné nebo kapalné fázi. V České Republice se ročně vyrobí asi 160 000 tun anilinu, ze kterého se dále vyrábí polyuretanové hmoty, které nachází využití především v automobilovém průmyslu.

Aby technologie anilinu v kapalně byla konkurence schopná, je třeba využít tepla uvolněného během hydrogenace. Proto je třeba provádět hydrogenaci nitrobenzenu při teplotách vhodných pro výrobu páry. Při poklesu koncentrace nitrobenzenu pod určitou hranici se začínají za vysokých teplot více uplatňovat vedlejší reakce a selektivita na anilin tak klesá. Proto se uvažuje o dvoustupňové technologii, kde se v prvním stupni hydrogenuje nitrobenzen při vysoké teplotě do neúplné konverze a ve druhém stupni se nitrobenzen dehydrogenuje při nízké teplotě.

Tato práce se zabývá studiem kinetiky hydrogenace nitrobenzenu v kapalně fázi katalyzované paladiem na uhlíku. Cílem práce bylo určit dílčí řád reakce vzhledem k nitrobenzenu i vodíku v oblasti nízkých koncentrací nitrobenzenu. Dále byl proveden bilanční kontinuální experiment a určen výkon katalyzátorů v obou reakčních zónách dvoustupňové technologie.

Sekce : Organická technologie

Hydrogenace kumarinu na Ni katalyzátorech

Autor: Roman Pikna
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová Ph.D.

Tato práce je zaměřena na hydrogenaci vonné látky kumarinu a vznikla ve spolupráci s firmou Aroma a.s. Kumarin je látka se sladkou, bylinnou, ve větších zředěních až ořechovou nebo tabákovou vůní. Jeho chuť je nahořklá v nižších koncentracích sladká, ořechová. Z toho důvodu je často používán v parfumérském průmyslu a jako potravinářské aditivum. Kumarin se v tělech krys a dalších hlodavců se metabolizuje na 3,4-kumarin epoxid, který je silně toxický. Proto je jeho použití v některých zemích zakázáno. Hydrogenované produkty dihydrokumarin a oktahydrokumarin mají podobné vonné a chuťové vlastnosti, ale jejich používání není zatím omezováno.

Hydrogenace kumarinu na oktahydrokumarin na Ni-nosičových katalyzátorech dosud nebyla v literatuře popsána, proto byla reakce studována zejména z hlediska vlivu teploty, tlaku vodíku a použitého rozpouštědla na výtěžek oktahydrokumarinu potažmo dihydrokumarinu. Bylo zjištěno, že alkoholová rozpouštědla reagují s některými meziprodukty reakce za vzniku dalšího žádaného produktu 3-(2-hydroxycyklohexyl)alkyl propionátu. Tento produkt reakce je možné převést na žádaný oktahydrokumarin pomocí vakuové destilace.

Sekce : Organická technologie

Syntéza a studium nových ligandů pro asymetrickou hydrogenaci iminů a ketonů

Autor: Jan Přech
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Rozdílný účinek optických antipodů na biologický systém je důvodem zájmu o asymetrické syntézy v mnoha odvětvích, zvláště pak v oblasti léčiv a vonných látek. Asymetrická transfer hydrogenace (ATH) je pak důležitou a efektivní metodou jejich přípravy z achirálních prekursorů.

Pro asymetrickou hydrogenaci C=N a C=O dvojné vazby vedoucí k chirálním aminům resp. alkoholům jsou nyní s úspěchem užívány organometalické komplexy ruthenia s chirálním diaminovým ligandem (S,S)-N-p-tosyldifenylethylendiaminem (TsDPEN).

Na základě studia mechanismu uvedené reakce byly navrženy a připraveny chirální ligandy principiálně odvozené od TsDPENu. Jedná se jednak o dvojici homologů difenylpropylendiamin a difenylbutylendiamin, které mohou být společně s difenylethylendiaminem alkylovány nejen tosylovou skupinou, ale také naftalensulfonylovou, nebo fluorensulfonylovou skupinou nebo 2,2,2-trifluor-1-phenyl-ethylchloridem popř. 1,1,1,3,3,3-hexafluor-2-fenyl-2-chlorpropanem. Tato paleta stavebních kamenů vede potenciálně ke skupině až 14 nových ligandů využitelných při asymetrické hydrogenaci. V této skupině bude navíc možné velmi snadno pozorovat strukturní vlivy jednotlivých částí ligandu na reakci.

Sekce : Organická technologie

Hydrogenace včelího vosku

Autor: Nikola Ruhswurmová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Na povrchu svící, plastik, pečetí a jiných výrobků ze včelího vosku vznikají bílé výkvěty ve formě povlaku či shluku krystalů. Analýzou těchto krystalů bylo zjištěno, že jsou tvořeny převážně alifatickými nenasycenými uhlovodíky. Tato práce se zabývala hydrogenací včelího vosku za účelem odstranění nenasycených uhlovodíků a zabránění růstu krystalů na voskových výrobcích. Hydrogenace vosku byla prováděna v rozpouštědle 1,4-dioxanu při tlaku 4,5 MPa a teplotě 90 °C. Byly použity katalyzátory Ru/C, Rh/C, Pt/C, Pd/C, Raney Ni a Raney Co. Stupeň hydrogenace byl sledován měřením jodového čísla, analýzou na GC a úbytkem tlaku vodíku v autoklávu. Nejúčinnějším katalyzátorem byl za daných podmínek Pd/C, při jehož použití bylo také dosaženo vysoké počáteční reakční rychlosti hydrogenace, a proto byl vybrán pro katalýzu hydrogenace vosku bez rozpouštědla za stejných podmínek. Takto byl připraven vosk zbavený všech násobných vazeb a nyní je v archivu na pozorování průběhu růstu výkvětů.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Příprava magnetických nanočástic oxidů železa pro medicínální diagnostiku

Autor: Yulia Belyaeva

Ročník: B3

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Kateřina Šimková, Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá přípravou magnetických imunonanočástic, které jsou používány pro separaci vysoce specifických látek pro konkrétní onemocnění, tzv. biomarkerů, z komplexní biologické matrice (krevní plazma, moč, kondenzát vydechaného vzduchu ad.). Principem separace biomarkerů z matrice je tvorba komplexu mezi antigenem (biomarkem) a protilátkou, která je imobilizována na povrchu magnetické nanočástice. Vzniklý komplex je z roztoku separován pomocí externího magnetického pole a po rozvolnění komplexu se množství získaného analytu detekuje pomocí LC-MS. Pro přípravu nanočástic byla použita koprecipitační metoda, při které dochází k alkalickému srážení Fe^{2+} a Fe^{3+} iontů. Hlavní pozornost byla při práci věnována různým způsobům stabilizace magnetického jádra – například pomocí tripolyfosfátu sodného (TPP) a chitosanu nebo kyseliny olejové a chitosanu. Sledován byl také vliv reakčních podmínek na velikost, monodisperzitu a tvar připravovaných částic. Pro charakterizaci připravených nanočástic byly používány fyzikálně-chemické techniky TEM, AFM, XRD, IČ či DLS. Na stabilizované nanočástice byly vázány monoklonální protilátky, čímž vznikl separační nástroj vhodný pro zpracování biologických vzorků.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Studium struktury membránových modelů stratum corneum pomocí rentgenové difrakce

Autor: Barbora Amélie Čuříková

Ročník: B2

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Dr. rer. nat. Jarmila Zbytovská

Stratum corneum (SC) je nejsvrchnější vrstvou epidermis, která tvoří hlavní bariéru kůže savců. Unikátní bariérové vlastnosti SC jsou dány především specifickým složením lipidických membrán, kde jsou ve vysoké míře přítomny ceramidy. Bylo zjištěno, že délka acylového řetězce ceramidu je kritickým parametrem pro (ne)propustnost lipidické membrány.

Naše vědecká činnost se zaměřuje na charakterizaci membránových modelů, jež jsou svým složením podobné složení SC. Vzorky obsahující volnou kyselinu lignocerovou, cholesterol a ceramid o různé délce uhlíkatého řetězce byly podrobeny rentgenové difrakci. Z naměřených difraktogramů je možno počítat tloušťku lipidické membrány, usuzovat počet fází v daném systému a posoudit míru mísitelnosti jednotlivých lipidů v membráně. Na základě výše zmíněných měření analyzujeme, jak ovlivňuje struktura konkrétního ceramidu (např. délka uhlíkatého řetězce či uspořádání polární hlavy) vlastnosti daného modelu. Z našich měření lze usoudit, že zatímco ceramidy s dlouhým řetězcem se a systému velmi dobře mísí s lignocerovou kyselinou, krátkořetězcové ceramidy vytvářejí nové fáze. Rovněž typ polární hlavy ceramidu má velký vliv na mísitelnost s ostatními složkami systému. Tyto závěry korelují s permeačními testy a jinými spektroskopickými studiemi na daných systémech.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

In vivo monitorování neurotransmiterů v mozkové tkáni

Autor: Gedeonová Erika
Ročník: B2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Kamila Syslová

Předkládaná práce se zabývá vývojem metody pro paralelní sledování hladin vybraných neurotransmiterů (dopamin, serotonin, GABA a glutamová kyselina) a jejich metabolitů (3 – methoxytyramin, homovanilová kyselina a dihydroxyfenolactová kyselina) v mozkové tkáni. Uvedená metoda se skládá z několika kroků – (1) *in vivo* odběr vzorku articiálního mozkomíšního moku (AFSF) s využitím mikrodialýzy a (2) stanovení jejich koncentračních hladin v ACSF pomocí kapalinové chromatografie spojené s hmotnostní detekcí. Z důvodu přítomnosti vysoké koncentrace solí (negativní ovlivnění limitů detekce) a velké rozdílnosti chemické struktury sledovaných analytů (obtížnost vyvinutí LC metody v jedné dimenzi) byla před samotnou LC-MS analýzu předřazena derivatizace. Úkolem derivatizační reakce bylo (1) zvýšit stabilitu neurotransmiteru (zejména teplotní), (2) zvýšit citlivost v MS detektoru vhodnou funkční skupinou (např. amino skupinou) a (3) umožnit provedení LC separace výše uvedených neurotransmiterů a jejich metabolitů. Jako vhodným derivatizačním činidlem byl zvolen 3-aminopyridin-N,N'-disuccinmidyl (APDS). Během práce byly optimalizovány jak podmínky přípravy derivatizačního činidla tak samotné derivatizační reakce.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Rychlost uvolňování paracetamolu z interaktivní směsi

Autor: Lenka Habásková
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámstný, Ph.D.

Práce se zabývá možnostmi zlepšení biodostupnosti léčivé látky, zvýšením rychlosti jejího uvolňování z lékové formy. To se dá řešit použitím API s malou velikostí částic. Toto řešení s sebou však nese problém tvorby shluků částic v rozpouštědle, což vede ke zhoršenému smočení povrchu a tím ke snížení rychlosti rozpouštění. Jedna z možností řešení tohoto problému je tvorba tzv. interaktivní směsi, v níž jsou částice API nanесeny na větší částici rozpustného nosiče. Cílem této práce bylo ověřit funkčnost tohoto řešení na paracetamolu jako modelové látce.

Jako nosné částice byly použity částice sprejově sušené a mleté krystalické laktózy, ze kterých byl síťováním oddělen podíl částic o stejné velikosti s největším zastoupením. Vlastní příprava směsi se prováděla mísením laktózy s mikronizovaným paracetamolem v rotačním mísiči. Bylo testováno i zařazení trituratione a vysokosmykového předmísení. Následně byla porovnána homogenita směsí získaných různými postupy. Uvolňování paracetamolu ze směsi bylo studováno metodou disoluce v průtokové cele. Nejvyšší rychlost uvolňování mikronizovaného paracetamolu vykazovala směs se sprejově sušenou laktózou s využitím vysokosmykového předmísení.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Studium možností využití Rafinátu II pro ethylenovou pyrolýzu

Autor: Dominik Hasal
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Vysokoteplotní štěpení látek (pyrolýza) se využívá k získání alkenických produktů, a to zejména ethylenu a propyleny. V této práci bylo studováno a porovnáváno chování C₄ uhlovodíků při pyrolýze čistých látek a směsí. Chování uhlovodíků ve směsi bylo studováno z hlediska reaktivity a selektivity primárních pyrolýzních produktů v závislosti na době zdržení v reaktoru. Bylo využito směsi označované jako Rafinát II. Studovaná směs obsahující 2-buteny, 1-buten, butan, isobutan a isobuten byla získána z C₄ pyrolýzní frakce po extraktivní rektifikací butadienu a separací isobutenu v rámci výroby MTBE.

Experimenty byly prováděny na laboratorní aparatuře využívající mikropyrolýzní plynovou chromatografii s online analýzou vznikajících produktů. Laboratorní experimenty koncipovány tak, aby konverze jednotlivých výchozích látek byla co nejvyšší, resp. aby bylo dosaženo co největšího výtěžku primárních pyrolýzních produktů. Byla porovnávána reaktivita a skladba produktů při pyrolýze čistých látek 1-buteny resp. isobutenu a směsi Rafinát II.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Štěpení β -pinenoxidu za vzniku p-menth-1-en-7,8-diolu

Autor: Luděk Král
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D., Ing. Lucie Potucká, Ph.D.

Tato práce navazuje na sérii prací zabývajících se přípravou perillového alkoholu, který má široké využití v různých odvětvích průmyslu. Je výchozí látkou pro přípravu vonné látky Mayolu. Ve farmaceutickém a veterinárním průmyslu je perspektivní jako látka pro regulaci rezistentních patogenů. Díky svým antibakteriálním vlastnostem je perillový alkohol do budoucna uvažován jako konzervant. Perillový alkohol může být připraven různými cestami, jednou z nich je štěpení β -pinenoxidu, a to na samotný perillový alkohol či na p-menth-1-en-7,8-diol, který je následně dehydratován. Pro obě syntézy jsou v současné době využívány především rtuťnaté katalyzátory. Použití těchto katalyzátorů je pro přípravu perillového alkoholu v širším měřítku nevhodné, jak pro ekonomickou, tak ekologickou náročnost. Proto jsou hledány jiné způsoby přípravy perillového alkoholu z β -pinenoxidu. Cílem této práce je najít vhodné reakční podmínky pro štěpení β -pinenoxidu ve vodě za vzniku p-menth-1-en-7,8-diolu, který je meziproduktem pro přípravu perillového alkoholu. Bude studován vliv přítomnosti či absence fázového rozhraní při použití různých rozpouštědel na průběh štěpení β -pinenoxidu.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Vývoj immobilizované nanosondy pro separaci 8-izoprostanu z biologických matric

Autor: Jana Mrozková
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Práce se zabývá vývojem molekulární sondy založené na imobilizaci protilátky proti 8-izoprostanu a jejímu využití pro separaci, případně pre-koncentraci této molekuly z biologických matric (moč, cerebrospinální tekutina, plazma). 8-izoprostan představuje významný biomarker oxidačního stresu, který vzniká při zvýšené koncentraci reaktivních kyslíkových radikálů (ROS) a nedostatečné funkci antioxidačních mechanismů organismu jako důsledek poškození buněčných membrán. V souvislosti s celou řadou onemocnění indukovaných oxidativním stresem (Alzheimerova ch., cystická fibróza, diabetes mellitus atd.) se hladiny tohoto biomarkeru zvyšují ze svých fyziologických hladin, což nabízí možnost tohoto jevu využít pro diferenciální diagnostiku. Nicméně jak fyziologická, tak patologická koncentrační úroveň se nachází na úrovni desítek pmol/ml, což vyžaduje využití citlivých separačních a rovněž detekčních technik. Předkládaná práce je věnována vývoji polymerní matrice, v níž jsou zakotveny protilátky se zachovanou biologickou aktivitou, čehož je využito pro vysoce selektivní a citlivou separaci 8-izoprostanu. Při vývoji metody přípravy matrice byly optimalizovány podmínky přípravy, podmínky kotvení protilátek, stejně jako metodika použití vyvinutého separačního nástroje.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Optimalizace tabletoviny přípravku s obsahem amlodipini besilas

Autor: Klára Nováková
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Cílem této práce bylo optimalizovat složení excipientu v tabletovině pro přímé lisování přípravku s obsahem léčivé látky amlodipini besilas, aby se dosáhlo lepších tokových vlastností tabletoviny, a tedy i snadnějšího zpracování a lepší hmotnostní stejnoměrnosti, bez přílišného zhoršení homogenity směsi. Stávající formulace obsahuje jako hlavní pomocnou látku hydrogenfosforečnan vápenatý s velmi malou velikostí částic. Cílem této studie proto bylo jej zčásti nebo zcela nahradit stejnou látkou s většími částicemi a otestovat vliv této změny na kvalitu tablet. Dobrá hmotnostní stejnoměrnost tablet je podmíněna dobrou tokovostí směsi, a ta závisí na velikosti částic v excipientu. Větší částice excipientu tokovost podporují, avšak mohou zvyšovat i míru segregace, a tím snižovat homogenitu. Byla proto připravena řada tabletovin zahrnující stávající formulaci a dále formulace, v nichž bylo 25 %, 50 %, 75 % a 100 % jemného hydrogenfosforečnanu vápenatého nahrazeno toutéž látkou s hrubším zrnem. Tokovost tabletovin byla měřena stanovením doby průtoku nálevkou. Z připravených tabletovin byly vylišovány tablety, u nichž byla následně vyhodnocena obsahová a hmotnostní stejnoměrnost.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Parametrická studie asymetrické transfer hydrogenace iminů na Noyoriho Ru(II) katalyzátoru

Autor: Jan Pecháček
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Asymetrická transfer hydrogenace představuje snadný, efektivní a selektivní způsob, jak redukovat prochirální ketony a iminy za vzniku chirálních alkoholů a aminů. Ve studovaném provedení jde o homogenně katalyzovanou reakci, kde jako katalyzátor slouží komplex Noyoriho typu [Ru (II) Cl (S,S)-*N*-(*p*-tosyl)-1,2-diphenylethylenediamine) (η^6 -*p*-cymene)], kde chirální ethylendiaminový ligand slouží jako chirální templát.

V této studii byl zkoumán vliv několika důležitých parametrů na průběh asymetrické hydrogenace iminů (substituovaných isochinolinů), a to nejen z pohledu optimalizace reakčních podmínek, ale také za účelem objasnění některých mechanistických aspektů dané reakce.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Teoretická studie asymetrické hydrogenace acyklických iminů

Autor: Petr Šot
Ročník: B2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

Roku 1996 Noyori et al. publikoval originální metodu asymetrické redukce iminů a ketonů. Tato reakce, katalyzovaná komplexy typu [RuCl(TsDPEN)(*p*-cymen)], má velký potenciál ve farmaceutickém průmyslu pro svoji jednoduchost provedení a vysokou stereoselektivitu.

Tehdy navržený reakční mechanismus předpokládal zformování šestičlenného cyklu, a to jak u ketonů, tak iminů. V nedávné době (2009) však Wills et al. poukázal na některé zásadní rozpory s tímto předpokladem (účast NH₂ skupiny, izomerie produktu, aj.) a navrhl zcela nový, „iontový“ mechanismus reakce pro redukci iminů.

Zatímco cyklické iminy (zejména substituované 3,4-dihydroisochinoliny) jsou z pohledu mechanismu intenzivně zkoumány, data pro acyklické iminy jsou poměrně nedostatečná. Tato studie si klade za cíl prozkoumání mechanismu hydrogenace acyklických iminů na Noyoriho komplexu prostřednictvím ab initio výpočetních metod se snahou o osvětlení význačných rozdílů vůči cyklickým iminům. Jako modelový substrát byl zvolen acetofenon benzylimin. Výpočty byly realizovány prostřednictvím programových balíčků Gaussian 03 a Gaussian 09.

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Multimarkerový screening kondenzátu vydechaného vzduchu

Autor: Jana Vondroušová
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je zaměřena na monitorování specifických molekul vznikajících při patologických procesech organismu (tzv. biomarkerů) v kondenzátu vydechaného vzduchu (KVV). Jako sledované látky v KVV byly zvoleny biomarkery plicních onemocnění – bronchiálního astmatu (cysteinylované leukotrieny, LTB₄) a onemocnění spojené s oxidativním stresem (8-isoprostan, malondialdehyd, alifatické aldehydy C₆-C₁₃, 4-hydroxy-trans-nonenal, 8-hydroxyguanosine, 8-hydroxy-2'-deoxyguanosine, 5-hydroxymethyl uracil, o-tyrosin a 3-chlortyrosin). Vyvinutá analytická metoda se skládá z předseparační části (imunoafinitní extrakce, SPE a derivatizace) a detekční metody na bázi kapalinové chromatografie s hmotnostní detekcí. V průběhu práce byla analytická metoda validována a následně použita v diferenciální klinické studii u lidí s plicními onemocněními a zdravými jedinci

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Příprava LFIA pro rychlou detekci návykových omamných látek

Autor: Aram Zolal
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Cílem předkládané práce je příprava diagnostického proužku na bázi lateral flow immunoassay (LFIA), který umožňuje monitorovat přítomnost amfetaminu v tělních tekutinách -moč, sliny a pot. Jako vhodné uspořádání LFIA bylo testováno přímé kompetitivní a nepřímé kompetitivní. V obou případech jsou na LFIA vytvořeny dvě linie imunoreagencií – testovací (= TL; amfetamin zakotvený na BSA) a kontrolní linie (= KL; sekundární protilátky). Při negativním výsledku se na LFIA objeví TL a KL, při pozitivním výsledku jen KL. K vizualizaci linií bylo použito koloidního zlata (velikost částic 20, anebo 40 nm) s imobilizovanými protilátkami. Během přípravy LFIA byla optimalizována řada parametrů (1) pH roztoku koloidního zlata pro konjugaci protilátek z důsledku rozdílnosti izoelektrického bodu jednotlivých protilátek; (2) rychlost kapilárního toku konjugátu nitrocelulóзовou membránou; (3) množství imunoreagencií v jednotlivých zónách. Připravený diagnostický proužek byl testován v koncentračním rozmezí amfetaminu 500-1000 ng/ml.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Organofilizace hydrotalcitu pro přípravu nanokompozitů PA6

Autor: Bc. Dana Lennerová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Při přípravě nanokompozitů polyamidu 6 - vrstevnatá plniva je zaměřena pozornost k vrstevnatým silikátům a v poslední době i ke grafenu. Využití hydrotalcitu je prozatím stranou zájmu. Nutnou podmínkou pro přípravu nanokompozitů na bázi hydrotalcitu je jeho organofilizace pro zajištění kompatibility obou složek.

Práce je zaměřena na přípravu plniva – hydrotalcitu - interkalovaného aminoetansulfonovou kyselinou v mezivrstvích. Tím se usnadní dispergace takto organofilizovaného hydrotalcitu v tavenině ϵ -kaprolaktamu při jeho následné polymeraci hydrolytickým či aniontovým mechanismem. Interkalace hydrotalcitu aminoetansulfonovou kyselinou byla prováděna srážecí reakcí, aniontovou výměnou a rehydratační reakcí. Produkty byly analyzovány rentgenovou difrakcí a termogravimetrickou analýzou.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Reakce růstových center poly(hex-1-en)u připraveného živou polymerizací iniciovanou diiminovými komplexy niklu II

Autor: Bc. Darja Hasalíková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Koncově funkcionalizované polymery představují skupinu chemických specialit cenných pro další modifikace polymeru: např. přípravu blokových kopolymerů nebo využití jako makromonomerů. Klasickou metodou jejich přípravy je transformace nejčastěji iontového, ale i koordinačního růstového centra reakcí s vhodným terminačním činidlem.

V této práci byly zkoumány možnosti transformace živých růstových center poly(hex-1-en)ových řetězců připravených pomocí diiminového komplexu niklu. Pro tyto účely byly syntetizovány nízkomolekulární poly(hex-1-en)y ($M_n=3000-10000 \text{ g.mol}^{-1}$), které byly terminovány čtyřmi typy činidel: reaktivními symetrickými molekulami (halogeny, kyslík, organosilany), přenosovými činidly (diethylzinek), reaktivními cykly (methyloxiran) a sloučeninami obsahujícími dvojnou vazbu (akryláty, undecenol, styren).

Získané produkty byly charakterizovány ^1H NMR spektroskopií (produkt reakce se styrenem i ^{13}C NMR spektroskopií). Vysokého stupně funkcionalizace bylo dosaženo pouze při reakci s undec-10-en-1-olem, jehož -OH skupina byla blokována trimethylalumiinem.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava porézních vláken

Autor: Gabriela Nováková
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Lenka Malinová, doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Práce je zaměřena na přípravu porézních polyesteramidových vláken. Tyto vláknenné vrstvy by díky jejich velkému povrchu mohly být využity jako nosiče pro mikroorganismy při bioremediaci odpadních vod. Polyesteramidy byly připraveny aniontovou kopolymerizací ϵ -kaprolaktamu a ϵ -kaprolaktonu a obsahovaly 20 a 40 mol % laktonových strukturních jednotek. Takto připravené kopolymery byly charakterizovány termickými vlastnostmi a dále byly studovány jejich roztokové vlastnosti v různých rozpouštědlech viskozimetrickou metodou. Schopnost polyesteramidů vytvářet porézní struktury byla testována na fóliích. Fólie byly odlity z roztoků kopolymerů v etanolu a v kyselině mravenčí s přidavkem chloridu vápenatého. Po odpaření rozpouštědla byla anorganická sůl vymyta vodou. Ze stejných rozpouštědel bylo provedeno elektrostatické zvlákňování z roztoků na partnerském pracovišti.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polykaprolakton – polymerní změkčovadlo PVC

Autor: Bc. Helena Fartáková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.; doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Adice (přídavek) změkčovadel do PVC značně rozšiřuje aplikační možnosti tohoto polymerního materiálu. V posledních letech přibývá prací, které se zabývají možnostmi náhrady nejčastěji používaných změkčovadel, ftalátů. Jednou z cest je skupina látek označovaných jako polymerní změkčovadla. Ty sice mají nižší měkčící účinnost, ale řeší asi nejdiskutovanější problém v této oblasti - migraci a vyluhování nízkomolekulárních změkčovadel z měkčených produktů. Předkládaná práce je zaměřena na využití polykaprolaktonu jako polymerního změkčovadla. Úvodem byla zkoumána možnost polymerace kaprolaktonu v přítomnosti organocínicích sloučenin, které se běžně využívají jako tepelné stabilizátory při zpracování PVC.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Molekulární kompozity polyamid 6 - polyamid 8

Autor: Bc. Jakub Janák

Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: Ing. Jana Kredatusová, Ph.D., doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Polyamid 6 je velmi ceněný konstrukční plast. Vyniká vysokou pevností a nízkým koeficientem tření. Jeho nevýhodou je relativně nízká rázová houževnatost v porovnání s jinými polyamidy. Výroba polyamidu 6 technologií polymeračního odlévání je poměrně jednoduchá. Snahou materiálového výzkumu je připravit polyamid 6 se zvýšenou houževnatostí. Jednou z možností je příprava blokových kopolymerů polyamid 6 – elastomer.

V této práci jsou testovány možnosti zvýšení houževnatosti vytvářením molekulárních kompozitů polyamidu 6 a jiných polyamidů. Jejich začleněním do matrice polyamidu 6 se naruší vytváření vodíkových můstků mezi řetězci polyamidu 6 a tím se ovlivní jeho krystalizace. Kompozity připravené aniontovou polymerací ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti polyamidu 8 byly charakterizovány stupněm přeměny a proměřeny termické vlastnosti.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava poly[*((R)*-3-hydroxybutyrátu)-blok-(L-laktidu)]

Autor: Bc. Jan Štěpánek

Ročník: M1

Ústav: Polymerů

Školitel: Ing. Lenka Malinová, doc. Ing. Brožek Jiří, CSc.

Poly(*(R)*-3-hydroxybutyrát) (PHB) je přírodní, biodegradovatelný polyester patřící do skupiny polyhydroxyalkanoátů. Je produkován řadou bakterií, které jej vytvářejí jako zásobní látku. PHB je obtížně zpracovatelný, jelikož jeho teplota tání je blízká teplotě degradace. Fyzikální a chemickou modifikací PHB lze pozitivně ovlivnit jeho zpracovatelnost.

Telechelický PHB vhodný pro modifikaci byl získán katalyzovanou solvolýzou vysokomolekulárního PHB hexan-1,6-diolem. Na koncových hydroxylových skupinách solvolyzovaného PHB se polymerací L-laktidu za vhodných podmínek vytváří blok poly(L-laktidu). V laboratoři byla modifikace prováděna v roztoku chloroformu, ve kterém je PHB omezeně rozpustný. V práci byla testována možnost provedení modifikace PHB v tavenině L-laktidu. Polymerace L-laktidu byla iniciována 2-ethylhexanoátem cínatým. Produkty polymerace byly charakterizovány stupněm přeměny, zastoupením strukturních jednotek a diferenciální skenovací kalorimetří.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vlastnosti směsi polyvinylchlorid/polyesteramid

Autor: Bc. Jan Švanda
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

PVC je komerčně dostupný polymer ceněný pro variabilitu vlastností, jichž lze dosáhnout mísením s jinými sloučeninami. Tato studie se zabývala možností zlepšení vlastností rigidního PVC modifikací houževnatým polyesteramidem. Byly syntetizovány dva kopolymery s ekvimolárním poměrem laktamových a laktonových strukturních jednotek, které se liší molekulovou hmotností. Polyesteramidy byly přidány k majoritnímu PVC ve dvou různých koncentracích a sledována byla především vrubová houževnatost reprezentující mechanické vlastnosti směsí. Hlubší pochopení na úrovni fázové mikrostruktury nezbytné pro zajištění lepších mechanických vlastností poskytly záznamy z měření DMA.

Nedílnou problematikou spojenou s PVC je jeho tepelná a barevná stabilita. Stabilita směsi PVC/PEA je negativně ovlivněna druhou polymerní komponentou. Byly studovány dva ekologicky způsobilé stabilizační systémy, které také výrazně ovlivnily kompatibilitu systému a s tím spojenou i vrubovou houževnatost.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Možnosti přípravy nanokompozitů polyamid 6 – grafen oxid

Autor: Jaroslav Minář
Ročník: B2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Václava Benešová, doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Nanokompozitní materiály na bázi polymerní matrice a vrstevnatých silikátů jsou předmětem zájmu již od 80. let minulého století. V posledních letech jsou intenzivně studovány možnosti přípravy nanokompozitů polymer – grafen/grafen oxid. Práce je zaměřena na přípravu grafen oxidu, jeho charakterizaci a možnosti jeho využití při přípravě nanokompozitů polyamidu 6.

Grafen oxid byl připraven modifikovanou Hummersovou metodou, založenou na dvoustupňové oxidaci grafitu směsí kyselina sírová/peroxodisíran draselný a kyselina sírová/manganistan draselný.

Grafen oxid je obtížně dispergovatelný v tavenině ϵ -kaprolaktamu. Proto byla nejprve připravena disperze grafen oxidu v roztoku poly(oxyethylenu) ve vodě a potom nadávkován ϵ -kaprolaktam. Voda byla odstraněna za sníženého tlaku. Aniontová polymerace byla iniciována Grignardovou sloučeninou a urychlena aktivátorem N-acyllaktamového typu. Produkty polymerace byly charakterizovány stupněm přeměny a termickými metodami (DSC, TGA).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava oligoesterů jako modelových produktů biodegradace aromaticko-alifatických kopolyesterů

Autor: Lenka Kotrchová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Práce je zaměřena na syntézu a charakterizaci nízkomolekulárních esterů modelujících produkty biologického rozkladu aromaticko-alifatických kopolyesterů.

Byly připraveny oligomery kyseliny polymléčné s polymeračním stupněm 4 až 5, které byly dále použity pro reakci s bis(2-hydroxyethyl)tereftalátem. Z reakční směsi dimethyltereftalátu s ethan-1,2-diolem byly izolovány estery se dvěma a třemi aromatickými jádry v molekule.

Získané oligoestery budou podrobeny testům ekotoxicity.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polymerace a kopolymerace trimethylenkarbonátu

Autor: Bc. Robert Mundil
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Cílem práce byla polymerace trimethylenkarbonátu (1,3-dioxan-2-on) poskytující biodegradovatelné polymery, které by mohly najít uplatnění v medicíně. Byly připraveny homopolymery na bázi trimethylenkarbonátu a také jeho kopolymery s cyklickým esterem, L-laktidem. Připravené polymery byly charakterizovány z hlediska jejich molekulové struktury a bylo vyhodnoceno jejich termické chování.

Při přípravě homopolymerů trimethylenkarbonátu byl sledován vliv způsobu čištění výchozího monomeru na rychlost neiniciované polymerace a na dosažené molární hmotnosti. Neiniciovaná polymerace umožňuje sledovat polymerační aktivitu vzhledem ke způsobu čištění monomeru a také poskytuje čistý polymer, který není kontaminován zbytky iniciačního systému.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Studium kovových struktur na polymerních substrátech

Autor: Bc. Tomáš Fidler
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Cílem práce bylo připravit a charakterizovat tenké kovové vrstvy na polymerním substrátě. Vrstvy byly připraveny metodou katodového naprašování. Naprašovaným kovem bylo zvoleno zlato a jako substráty byly zvoleny polymery PET a PLLA ve formě 50 μm fólií. Naprašování jednotlivých vzorků probíhalo po dobu 10-300 s při proudech 20 a 40 mA.

Spojitosť vrstev Au byla studována měřením plošné rezistivity modifikovanou dvoubodovou metodou. Povrchová morfologie byla charakterizována metodou AFM a LSCM. Tloušťka připravených vrstev byla stanovena měřením vrypu na kontrolním substrátu (sklo) metodou AFM. Vybrané vzorky PLLA byly po depozici Au vystaveny teplotě odpovídající T_g (PLLA) $\sim 60^\circ\text{C}$ po dobu 30 minut a následně byla metodou AFM měřena morfologie těchto vzorků.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Studium fyzikálně chemických vlastností Ag a Au nanostruktur

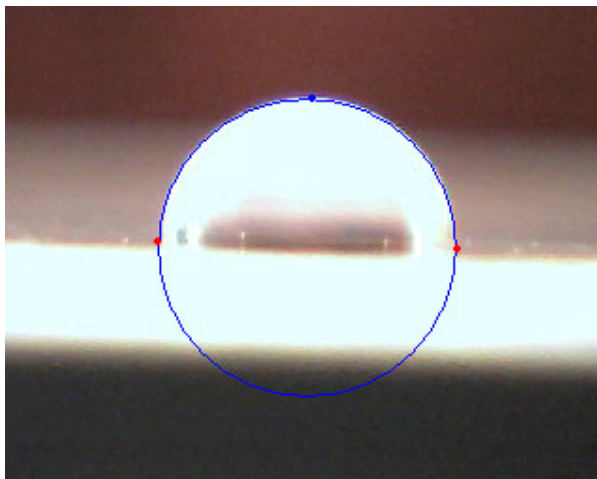
Autor: Petr Juřík
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Práce se orientuje na studium výjimečných vlastností kovových nanostruktur vyplývajících z jejich kvantového omezení. Cílem práce byla příprava a charakterizace takovýchto struktur. Příprava byla prováděna pomocí katodového naprašování a post-depozičního žíhání Ag a Au vrstev na pevném substrátu-teflonu. Povrchová struktura byla studována pomocí AFM, elektrická a materiálová spojitost byla studována měřením jejich plošné rezistence a pomocí rentgenové fotoelektronové spektroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Vliv plazmatické modifikace na vlastnosti PLLA a PMP

Autor: Iva Michaljaničová
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.



Práce se zabývá studiem změn povrchových vlastností látek PLLA a PMP způsobených plazmatickou modifikací. Byl měřen kontaktní úhel a povrchová energie bezprostředně po modifikaci při různých dobách expozice argonové plazmy. Bylo zjištěno, že s rostoucí dobou modifikace velikost kontaktního úhlu klesá a povrchová energie roste. Pozornost byla věnována také gravimetrickému stanovení úbytku polymerů a výpočtu tloušťky ablatované vrstvy. Výsledky práce ukazují, že v obou případech narůstá ablace s dobou expozice v plazmě. Bylo rovněž studováno stárnutí polymerů. Více zestárlé vzorky vykazují větší kontaktní úhel a menší povrchovou energii. Modifikace

probíhala při výkonech 5W a 10W. Struktura morfologických změn povrchu byla pozorována metodou AFM a pomocí konfokálního mikroskopu. Na práci bude navazovat sledování hmotnostních a strukturních změn způsobených leptáním a následně studií adheze a proliferace buněk na vybraných vzorcích.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Studium dvousložkových směsí polyethylenglykol-voda

Autor: Petra Parobková
Ročník: M2
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Zdeňka Kolská, Ph. D.

Cílem této práce je zjistit fyzikálně-chemické vlastnosti polyethylenglykolů o různých molárních hmotnostech, např. rozpustnosti, skupenství, tepelnou stabilitu, toxicitu a další. Rovněž bude stanovena hustota a dodatkový molární objem binárních směsí v závislosti na teplotě a také index lomu. V této práci jsou měřeny polyethylenglykoly o molárních hmotnostech 200, 300, 400 a 600 g·mol⁻¹ při teplotách 20, 25, 30, 40, 50 a 60 °C. Tato práce se zabývá možným využitím naměřených dat v oblasti farmaceutického průmyslu a porovnáním publikovaných dat s daty získanými z odborné literatury.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Stárnutí a vliv roubování HDPE a PS

Autor: Bc. Lucie Splítková
Ročník: M2
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová

Práce se zabývá vlivem plasmy s následným roubováním na povrch polymerního materiálu. Studovanými materiály byly vysokohustotní polyethylen (HDPE) a polystyren (PS), které byly modifikovány Ar^+ ionty při výkonu 8 W po dobu 50, 100 a 300 s. Na plasmou modifikované polymerní vzorky byl roubován cysteamin, popř. cysteamin s poly(ethylenglykolem) (PEG) o molekulové hmotnosti 20 000 g/mol. Stárnutí materiálu bylo studováno pomocí metody goniometrického měření kontaktního úhlu.

Bylo zjištěno, že vlivem modifikace vzorků v plasmě dochází k výrazným změnám hodnot kontaktního úhlu. U zestárých vzorků s rostoucí dobou expozice kontaktní úhel roste. K dalším změnám v povrchové smáčivosti dochází vlivem roubování. U vzorků roubovaných cysteaminem je hodnota kontaktního úhlu vyšší oproti hodnotám vzorků, u kterých je navíc navázán i PEG.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Mapování magnetických polí permanentních magnetů

Autor: Bc. Eliška Stránská
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Pavel Novotný, CSc.

Cílem práce bylo pomocí odborné literatury a dostupného software numericky zmapovat velikost a směr magnetického pole permanentního magnetu. Následným měřením byla ověřena správnost těchto metod.

Pro práci byl vybrán axiálně magnetovaný neodymový válcový magnet s dutinou. Magnetická indukce byla určována v axiálním směru podél osy magnetu. K měření byl využit Teslametr s Halloovou sondou.

Magnetická indukce podél osy magnetu byla určena pomocí měření v laboratoři, numerickou metodou pomocí přímého dosazení do definovaného vzorce a programem FEMM 4.2, kde byl model zpracován metodou konečných prvků.

Porovnáním výsledků byla určena správnost jednotlivých metod a jejich vhodnost v určování magnetické indukce podél osy axiálně magnetovaného permanentního magnetu ve tvaru prstence.

Výsledky měření budou použity pro optimalizaci mikropolarimetrické metody při studiu aktivity chirálních látek.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Roubování stříbrných nanočástic na PE

Autor: Veronika Strnadová
Ročník: M2
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková

Polymery nachází díky své variabilitě široké uplatnění v mnoha odvětvích, například v technických aplikacích, tkáňovém inženýrství či v lékařství. Cestou k ještě lepším vlastnostem je jejich modifikace (fyzikální, chemická či mechanochemická). Při mé práci byla studována modifikace plasmou a následné roubování vzorků. Testovaným materiálem byl vysokohustotní polyethylen (HDPE), jehož povrch byl modifikován urychlenými Ar^+ ionty. Doba modifikace byla postupně nastavena na 50, 100 a 300 s a takto modifikované vzorky byly ihned po modifikaci ponořeny do roztoku bifeny-4,4'-dithiolu v metanolu ($4 \times 10^{-3} \text{ mol.l}^{-1}$) a po 24 hodinách vyjmuty a ponořeny do koloidního roztoku stříbrných nanočástic v citrátu ($0,5 \text{ g.l}^{-1}$). Pro srovnání bylo taktéž provedeno roubování pouze v bifeny-4,4'-dithiolu, stříbrných nanočásticích a v destilované vodě. Charakter povrchu vzorků byl studován goniometrickým měřením kontaktního úhlu na přisedlé kapce destilované vody. Nejnižší hodnoty kontaktních úhlů byly naměřeny ihned po vyjmutí a vysušení vzorků. Během stárnutí hodnoty kontaktních úhlů (v závislosti na počtu dní od modifikace) postupně vzrůstaly až do relativně ustálené hodnoty, která byla naměřena 25. den po modifikaci. Dále bylo zjištěno, že nejméně smáčivý povrch mají vzorky roubované nejprve v bifenyldithiolu a následně ve stříbrných nanočásticích.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Tepelné stárnutí kontaktů na SiC

Autor: Bc. Jiří Vojtík
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

SiC je perspektivním polovodivým materiálem v moderní výkonové elektronice. Součástí každého elektrického zařízení je jeho kontakt pro zapojení do ostatních částí obvodu. Pro kontakty na SiC se používají různé kovy nebo slitiny, velmi častý je Ni. Tato práce je zaměřena na stárnutí Ni, NiSi_2 a Si ohmických kontaktů na SiC. Pro dosažení ohmického chování kontaktů je potřeba je vyžíhat ve vakuu za vysokých teplot. Stárnutí představovalo vystavení vzorků teplotě 300°C na vzduchu po dobu desítek dnů. Tyto podmínky simulují situaci, za které bývají součástky z SiC provozovány. Také byly testovány kontakty s ochrannou vrstvou z SiO_2 a tzv. sekundární kontakty, navíc také s ochrannou SiO_2 vrstvou. Sekundární kontakty představují zajímavé řešení, kdy je původní kontakt sleptán a nahrazen novým. Sekundární kontakt využívá zachovaných elektrických vlastností původních kontaktů a může přidat např. korozní nebo tepelnou odolnost, zlepšení adheze kontaktu k SiC substrátu atd. Z výsledků stárnutí vyplývá, že již během několika dnů stárnutí Ni kontakty velmi degradují a nejsou již dále použitelné. Vzhledem jsou nápadné oxidací. Naproti tomu NiSi_2 a Si kontakty nedegradují nebo jen ve velmi malé míře. Přínos SiO_2 ochranné vrstvy je diskutabilní vzhledem ke zjištění, že má pórovitý charakter.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Chemické vodivostní senzory na bázi nanomateriálů

Autor: Adéla Vošvrdová
Ročník: M2
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.

Cílem práce bylo připravit senzory na bázi tenkých vrstev směsných sloučenin oxidu cíničitého a acetyl-acetonátu kovu (Sn nebo Pd) na keramickém substrátu. Vrstvy byly připravovány pulzní laserovou depozicí z nanoprášku. Na těchto senzorech byl měřen stejnosměrný i střídavý odpor s cílem zjistit citlivost senzorů, s různou tloušťkou aktivní vrstvy, na různé atmosféry a při různých teplotách. Referenční atmosférou byl vždy vzduch. Dalším cílem bylo také zjistit optimální tloušťku aktivní vrstvy.

Bylo zjištěno, že směsné sloučeniny oxidu cínu a organokovových materiálu (SnAcAc, PdAcAc) mohou velmi dobře fungovat jako aktivní vrstvy vodivostních senzorů pro detekci různých atmosfér, speciálně redukčních plynů. Dále byly naměřeny teplotní závislosti a impedanční charakteristiky těchto vrstev a zpracovány do grafů.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Vliv roubování na povrchové vlastnosti polymeru

Autor: Pavlína Žáková
Ročník: M1
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Práce se zabývá studiem povrchových vlastností HDPE, který byl modifikován v inertním plazmatu a následně roubován různými koncentracemi dithiolů. Doba modifikace v plazmatu byla 50, 100 a 300 s. Jako roubojící dithioly byly použity ethan-1,2-dithiol (EDT) o koncentracích 0,2, 1 a 2hm% a [1,1'-bifenyl]-4,4'-dithiol (BFD) o koncentraci 0,2 hm%. Povrchové vlastnosti byly studovány pomocí goniometrie (měření kontaktního úhlu), mikroskopie atomárních sil (AFM) a rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS). Výsledky měření ukazují, že vzorky jsou zestárlé, tj. mají ustálenou hodnotu kontaktního úhlu "okolo" 18. dne pro vzorky modifikované plazmatem a po 21. dnu pro vzorky modifikované roubováním dithiolů. Hodnota kontaktního úhlu se zvyšuje s dobou expozice v plazmatu a tím se snižuje polarita povrchu. S rostoucí koncentrací roubojících dithiolů dochází ke zvýšení polarity povrchu. Povrchová morfologie je výrazně ovlivněna u roubovaných vzorků, kde v případě roubování EDT dochází k narušení struktury povrchu a změně morfologie. V případě BFD či modifikace pouze v plazmatu je zachována lamelární struktura HDPE. Procentuální zastoupení síry na povrchu HDPE se zvyšuje s rostoucí koncentrací roubojících dithiolů.

Sekce : Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Roubování bifenyldithiolu a zlatých nanočástic na PTFE

Autor: Hana Žďárová
Ročník: M2
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Zuzana Makajová

Práce se zabývá roubováním bifenyl-4,4'-dithiolu (BFD) a následným roubováním zlatých nanočástic na plasmaticky modifikovaný PTFE. BFD byl na PTFE vzorky roubován po různé dlouhou dobu (1 hod, 5 hod, 10 hod, 15 hod, 20 hod a 24 hod), zlaté nanočástice pokaždé stejně dlouhou dobu (24 hod).

Ke zjištění hmotnostních změn modifikovaných vzorků byla použita gravimetrická metoda. Pro zkoumání povrchových vlastností bylo použito goniometrické měření kontaktních úhlů.

Bylo zjištěno, že expozicí plasmatem dochází k výrazné změně kontaktních úhlů. Smáčivost povrchu je významně ovlivněna dobou roubování BFD i přítomností zlatých nanočástic.

Sekce : Informatika a chemie

Přenositelné počítačové prostředí pro zpracování chemických dat

Autor: Ivan Čmelo
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

Práce se zabývá možnostmi snížení časové a technické náročnosti přípravy prostředí vhodného k cheminformatické činnosti. Je zohledněna uživatelská dostupnost, šířitelnost a poskytovaná paleta nástrojů, část práce pojednává o hledání jejich kompromisu volbou odpovídající metody zpracování.

Byly postupně vyzkoušeny dva odlišné přístupy k řešení, jmenovitě virtuální stroj a linuxová distribuce. Modifikovaná distribuce se v průběhu tvorby ukázala jako pro účely práce výrazně praktičtější řešení.

Výsledkem je distribuce Ubuntu rozšířená o vybrané cheminformatické nástroje a knihovny při zachování veškeré původní funkcionality, zejména pak provozu v „live“ režimu. Proces tvorby je zdokumentován a doplněn o skripty usnadňující tvorbu případných dalších verzí.

Sekce : Informatika a chemie

Software pro výpočet asociačních konstant

Autor: Bc. Andrea Kalčicová
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Vývoj nadstavbového software pro program Opium, který slouží k výpočtu asociačních konstant komplexačních reakcí. Opium se používá na Ústavu organické chemie k výpočtu konstant z NMR, UV-VIS spektroskopie, potenciometrických titrací apod. Cílem práce bylo navrhnout šablonu, která vygeneruje vstupní soubor pro program Opium pouze ze zadání slovního a číselného namísto ručního psaní vstupního souboru, který tvoří spousta čísel, znaků a symbolů. Pro vývoj této nadstavby byly použity technologie XML, XSLT a validační schémata DTD, Relax NG a XML Schema.

Sekce : Informatika a chemie

Grafické uživatelské rozhraní programu XMR - XMRui

Autor: Martin Mastný
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D, Mgr. Miroslav Šimek

Tento projekt se zabývá tvorbou grafického uživatelského rozhraní (GUI) programu XMR, který slouží pro simulace katalytických konvertorů. Celý projekt je rozdělen do několika dílčích kroků, z nichž tento se zabývá tzv. front-endem, neboli klientskou částí, aplikace. Ke tvorbě projektu je použita volně dostupná nástavba programovacího jazyka JAVA – Google web toolkit (GWT) a složitější grafické prvky jsou řešeny pomocí technologie Adobe Flash.

Sekce : Informatika a chemie

Technologie sémantického webu

Autor: Anna Motejlková
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Cílem práce je bližší seznámení s problematikou sémantického webu, který by měl být rozšířením a zdokonalením současného World Wide Webu.

Výsledke práce je rešerše šířeji používaných formátů pro tvorbu sémantického webu s důrazem na využití XML technologií.

Sekce : Informatika a chemie

Vizualizace chemického prostoru

Autor: Filip Sedlák
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: doc. Daniel Svozil, Ph.D.

Práce se zabývá zobrazováním tzv. knihoven chemických látek. Účelné rozmístění chemických látek v prostoru umožní vzájemné porovnání chemických knihoven. Umístění chemické knihovny a rozlehlost prostoru, který pokrývá, odráží druhy a rozmanitost sloučenin v knihovně obsažených. Tuto znalost lze využít například při přípravě experimentů prováděných metodou *High-Throughput Screening*, kdy se experimentátor snaží pokrýt co největší množství rozdílných chemických struktur.

Prezentované zobrazení je navrženo tak, aby se chemicky podobné látky nacházely blízko sebe. Přidáním informací o biologické aktivitě je možné zkoumat změny aktivity v souvislosti se změnami chemické struktury.

Při technické realizaci je kladen důraz na uživatelskou přívětivost a využívání standardních technologií nezávislých na platformě. Výsledkem této práce je webová aplikace.

Sekce : Informatika a chemie

Použití softvéru pro 3D vizualizaci vo výuce na VŠCHT Praha

Autor: Jaroslav Skalický
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

Vo svojej práci sa pokúšam navrhnúť spôsob, ako čo najefektívnejšie využívať v priebehu výuky počítačovú učebňu A30 vybavenú 3D projektorom. Riešenie má niekoľko bodov: nastavenie grafickej karty počítača do správneho režimu, návrh spôsobu ako vkladať 3D obsah do výukovej prezentácie, nastavenie jednotlivých vizualizačných nástrojov a nakoniec návrh metódy ako pred konečným zobrazením obsahu zvoliť požadovaný nástroj z ponuky.

Sekce : Informatika a chemie

Grafické uživatelské rozhraní programu XMR - backend

Autor: Milan Voršilák
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D, Mgr. Miroslav Šimek

Tento projekt se zabývá tvorbou grafického uživatelského rozhraní (GUI) programu XMR, který slouží pro simulace katalytických konvertorů. Celý projekt je rozdělen do několika dílčích kroků, z nichž tento se zabývá tzv. back-endem, serverovou částí, která zajišťuje přenos dat mezi programem XMR a vytvářenou grafickou nadstavbou. Díky zvolení Google Web Toolkit (GWT) je celý projekt psán v jazyce Java.

Sekce : Technologie restaurování I.

Podmínky měření ovlivňující použití elektrochemické potenciodynamické metody pro identifikaci historických kovových materiálů v praxi

Autor: Bc. Jan Švadlena
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoužil, Ph.D.

V rámci práce byl studován vliv podmínek měření (rychlost polarizace, odvětrání roztoku, velikost částic) a vyhodnocení dat na použitelnost jednoduché metody pro identifikaci historických kovových materiálů v restaurátorské praxi. Metoda spočívá v potenciostatické redukci (-1 V/ACLE) korozních produktů imobilizovaných na PIGE (paraffin impregnated graphite electrode) na kov a jeho následné potenciodynamické anodické rozpouštění v roztoku 0,1M kyseliny šťavelové. Metoda ukázala na omezenou možnost identifikace kovových prvků. Ze sledovaných podmínek měření má významný vliv zejména velikost částic korozních produktů.

Sekce : Technologie restaurování I.

Strukturní transformace cínu za snížených teplot

Autor: Eliška Jindrová
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Práce se zabývá studiem strukturní transformace cínu z $\beta \rightarrow \alpha$ modifikací za snížených teplot 8 °C, -20 °C, -40 °C a -60 °C. Byla sledována rychlost transformace, vliv heterogenních částic a α modifikace a mechanická deformace na transformaci za snížených teplot. Dále se práce zabývá zpětnou transformací cínu z $\alpha \rightarrow \beta$ za pokojové teploty a zvýšených teplot 40 °C, 60 °C. Cílem této práce bylo experimentálně ověřit, při jaké teplotě dochází k nejrychlejší transformaci cínu a jaký mají vliv výše uvedené faktory na ní. Poté bylo cílem ověřit, jak se chová α modifikace za zvýšených teplot.

Sekce : Technologie restaurování I.

Archeometalurgická studie portugalských chalkolitických artefaktů z mědi

Autor: Kristýna Kolářová
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Maria de Fátima D. Araújo; Dr. Rui Silva

První měděné artefakty, objevené ve střední části jižního Portugalska, jsou datovány do období přelomu 4. a 3. tisíciletí př.n.l.. Artefakty pochází z chalkolitického sídliště Vila Nova de São Pedro (VNSP). Rozsáhlá sbírka z naleziště VNSP, vystavená v Archeologickém Muzeu v kostele Carmo (Lisabon), je tvořená stovkami kovových artefaktů a fragmentů a tisíci dalších předmětů z různorodých materiálů.

Cílem práce je chemická a strukturní charakterizace 15 kovových artefaktů ze sídliště VNSP. Chemické složení bylo určeno nedestruktivní metodou RTG fluorescenční analýzy, mikrostruktura pomocí optického mikroskopu a elektronového rastrovacího mikroskopu. Projekt je součástí dlouhodobé studie probíhající na Instituto Tecnológico e Nuclear v Sacavém.

Artefakty jsou složeny z Cu a slitiny Cu s různým množstvím As. Vykazují typickou rekrystalizační strukturu s polygonálními zrnky a žíhacími dvojčaty, tzn., že artefakty byly tvářeny za studena a dále žíhány. U artefaktů z arsenové mědi bylo prokázáno dendritické odmíšení. Artefakty z čisté mědi vykazují charakteristické inkluze oxidu měďného v základní Cu matici. Eutektikum Cu a oxidu měďného tvoří síťoví po hranicích tvářených dendritických zrn. Korozní produkty jsou tvořeny vrstvou oxidu měďného a zásaditého uhličitanu měďnatého.

Sekce : Technologie restaurování I.

Povrchové úpravy odlitků umělecko-řemeslných děl ze zinku

Autor: Alžběta Kopecká
Ročník: M1
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Nutnost restaurovat zinkové plastiky vedla ke zkoumání historicky používaných povrchových úprav zinkových odlitků dekorativních i užitkových předmětů a jejich obnovy se zaměřením především na vytváření galvanických povlaků. Bylo prověřeno několik postupů původních povrchových úprav na vzorcích z restaurované zinkové plastiky s degradovanou původní vrstvou pomědění i na nově odlitých vzorcích. Na vzorcích připravených z plastiky, která byla téměř 140 let exponovaná v exteriérových atmosférických podmínkách, bylo provedeno také vyhodnocení stavu a rozsahu degradace původní měděné vrstvy. Na základě získaných výsledků s přihlédnutím k negativnímu účinku měděné vrstvy na korozní odolnost a degradaci zinkových plastik při atmosférické expozici bylo použití obnovy měděné vrstvy u restaurovaných zinkových předmětů galvanickým způsobem vyhodnoceno jako jednoznačně nevhodné. Přijatelnou alternativou se jeví použití organického nátěrového systému plněného daným kovem.

Sekce : Technologie restaurování I.

Konzervace železných archeologických nálezů č. 1226 a 1388

Autor: Marie Netušilová
Ročník: M2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová



Príspevek predstavuje konzervační ošetření dvou železných předmětů, pocházejících z archeologického průzkumu „3/04“ na území sídla Senátu ČR a datovaných do 16.–17. století. Před vlastním zásahem byl proveden nedestruktivní průzkum (vizuální, rentgenografie, stereomikroskopie), na jehož základě byly předměty identifikovány jako klíč (č.1226) a pant (č. 1388). Konzultacemi s konzervátory z AÚ AV ČR a Ing. Drábkovou byl určen tzv. „původní povrch“. Klíč se nacházel v podobě tří fragmentů a stejně jako pant, byl silně zkorodovaný. Z tohoto důvodu byly předměty čištěny mechanicky – jemným pískováním (balotina B 112, tlak do 0,3 MPa) a to až do dosažení „původního“ povrchu. Vzhledem k vysoké kontaminaci korozních produktů ionty Cl⁻ (pozitivní test s AgNO₃), působících v tomto případě jako stimulanty korozních procesů, byla dalším krokem desalinace v dusíkem odvzdušňované destilované vodě. Po odsolení a vysušení následovala stabilizace povrchu tanátováním, slepení fragmentů nálezu 1226 (epoxidové lepidlo) a finální konzervace lakováním (Paraloid B72®) a voskováním (Korex MB®). Takto ošetřené předměty byly uloženy v krabičkách z lepenky s alkalickou rezervou, vyložených pěněním PE. Vzhledem k nízkému stupni zachovalosti kovových jader nálezů nebyl možný detailnější průzkum (metalografie).

Sekce : Technologie restaurování I.

Určení historického způsobu výroby bronzového prstenu z období mohylové kultury

Autor: Zuzana Sedláková
Ročník: B2
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Cílem práce bylo určit způsob výroby bronzového prstenu z období mohylové kultury v Čechách. Byla zde možnost, že byl vyroben protažením, což je metoda v té době neznámá. Období mohylových kultur na území dnešní České republiky spadá do doby mezi léty 800 a 350 před naším letopočtem, má spíše lokální charakter a její původ je z okolí Horního Rakouska (lokalita Hallstatt).

K dokumentaci povrchu prstenu byl použit světelný mikroskop OLYMPUS B071 se softwarem Deep Focus a elektronový skenovací mikroskop TESCAN VEGA 3, k pozorování struktury a k její fotodokumentaci byl využit metalografický mikroskop PME 3. K určení chemického složení kovu a vměstků byla využita metoda elektronového skenovacího mikroskopu TESCAN VEGA 3 s EDS analyzátozem Oxford Instruments INCA 350. Z malého fragmentu byly pak připraveny metalografické výbrusy, na kterých byla pozorována struktura materiálu.

Podle zjištěných informací byl prsten o složení 88% Cu a 12% Sn pravděpodobně vyroben kováním. Struktura kovu odpovídá tvářenému bronzu s obsahem sulfidických vměstků, které jsou deformovány ve směru tvářením. Povrch byl pravděpodobně následně dobroušen, čemuž napovídají černé rýhy na jeho povrchu. Technologie výroby protažením tak byla vyloučena.

Sekce : Technologie restaurování I.

Korozní monitoring pro ochranu kovových památek

Autor: Kateřina Tomšová
Ročník: B3
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Korozní monitoring slouží ke kontinuální kontrole korozní agresivity prostředí na materiál, jehož nízkou korozní rychlost požadujeme. Zkoušený monitorovací systém pracuje na principu resistometrické metody. Resistometrická čidla vyrobená z mědi, stříbra, olova, železa a bronzu byla vyrobena magnetronových naprašováním na keramický substrát. Čidla byla testována za řízeně měnící se teploty a relativní vlhkosti. V některých případech jsou korozní čidla schopna zaznamenat korozní úbytek na atomární úrovni. Monitorovací systém je tedy vhodný k měření rychlosti atmosférické koroze i při velmi nízké agresivitě prostředí.

Sekce : Technologie restaurování II.

Odolnost malt z Románského cementu a vápenného hydrátu vůči krystalizaci solí

Autor: Barbora Benetková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Práce sleduje vliv krystalizace $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ na degradaci malt v závislosti na jejich složení a době tvrdnutí. Byly připraveny vzorky malt s různým poměrem Románského cementu a vápenného hydrátu. V průběhu tvrdnutí byly pravidelně roseny, aby byla zajištěna dostatečná vlhkost potřebná pro jejich hydrataci. Vzorky byly testovány na odolnost vůči krystalizaci dekahydrátu síranu sodného po 7, 14, 28 dnech a 3 měsících tvrdnutí. Výsledky měření porovnávají odolnost vzorků v závislosti na jejich složení a době tvrdnutí.

Sekce : Technologie restaurování II.

Konsolidace dřeva opakovanou impregnací

Autor: Kristýna Boumová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Konsolidace dřeva je konzervační metoda, jejímž cílem je zlepšit mechanické vlastnosti poškozeného dřeva, např. působením dřevokazného hmyzu. Výsledek konsolidace závisí na obsahu konsolidantu ve dřevě a jeho rozložení, tedy závisí na metodě impregnace a fyzikálně chemických vlastnostech roztoku konsolidantu.

Nátěr je impregnační metoda, jejíž hybnou silou jsou kapilární síly. Je to nejméně účinná metoda impregnace, nicméně je to jediná vhodná metoda pro konsolidaci značně poškozených objektů. Proto cílem práce bylo ověřit účinnost opakované impregnace. Opakovaná impregnace na základě kapilárních sil byla studována na vzorcích zdravého lipového dřeva, jako roztok konsolidantu byly použity roztoky Paraloidu B72 (kopolymer ethylmethakrylátu s methylakrylátem) v toluenu, xyleny a acetonu o koncentraci 5 a 7,5 hm. %. Impregnace vzorků byla provedena dvakrát na stejných vzorcích metodami kapilárního vztlínání v axiálním směru a ponorem. Výsledek konsolidace byl vyhodnocen na základě hmotnostního a objemového příjmu roztoku konsolidantu a obsahu konsolidantu ve dřevě.

Sekce : Technologie restaurování II.

Ověření účinnosti mikroemulzního systému při odstraňování polymerů a vosků pomocí celulosových obkladů.

Autor: Anna Fialová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Předměty kulturního dědictví jsou často kontaminované polymery a vosky, které mohou výrazně změnit vlastnosti materiálu předmětu a urychlit jeho degradaci. V práci byla zjišťována možnost uplatnění vodné mikroemulze organických rozpouštědel při jejich odstraňování. Vzorky pro čištění byly připraveny nanesením akrylátových kopolymerů Paraloidu B72 a Veropalu UV-40, včelího vosku a parafínu na několik různých podkladů, čištění bylo provedeno pomocí celulosových obkladů nasycených zkoumanou mikroemulzí. Hodnotila se obtížnost odstranění obkladu ze vzorku, výsledný vzhled vzorku, hmotnostní úbytek odstraňovaného filmu a změna úhlu smáčivosti čištěného povrchu v porovnání s čistým podkladem a původním filmem.

Sekce : Technologie restaurování II.

Využití křemeliny jako pucolánové přísady do vápenných malt

Autor: Zuzana Gazdová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Práce ověřuje předpoklad, že křemelinu lze použít jako pucolánovou přísadu do vápenných malt. U čerstvých malt byl stanovován začátek tuhnutí. Dále byla připravena zkušební tělesa, u kterých se po urychlené karbonataci stanovovala pevnost v tlaku, pórovitost metodou rtuťové porozimetrie, nasákavost, otevřená pórovitost a odolnost vůči krystalizaci síranu sodného. Připraveno bylo 6 směsí, které umožňují srovnání výše uvedených vlastností čistě vápenné malty, malty s přídavkem metakaolinu a malt s přídavkem dvou druhů křemeliny.

Sekce : Technologie restaurování II.

Odsolování dřevěné truhly

Autor: Ksieniiia Hapitsonova
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Klára Drábková

Objektem konzervátorské práce byla lidová malovaná truhla z roku 1867, ve které byla uložena posypová sůl. Působením soli došlo k rozvláknění dřeva a zhoršení jeho mechanických vlastností; malba byla poškozena, někde zcela chybí. Železné části byly silně zkorodovány. V rámci konzervátorské práce byly kovové části mechanicky čištěny (ocelový kartáč, otryskávání), dále bylo provedeno tanátování a lakování 10% roztokem Paraloidu B-72 v toluenu. Kovové části, které bylo možné odmontovat, byly před tanátováním odsoleny. Barevná vrstva truhly byla očištěna benátským mýdlem a 5% roztokem polyvinylalkoholu. Před odsolováním byla barevná vrstva zajištěna 10% roztokem Paraloidu B-72. Poté byla truhla odsolována pomocí vodního vysavače. Odmontované dřevěné části byly odsoleny pomocí obkladů z buničiny. Po odsolování bylo dřevo zpevněno 20% roztokem Paraloidu B-72: celá truhla – nátěrem, odmontované části – vakuovou impregnací.

Sekce : Technologie restaurování II.

Kvalitativní analýza přírodních organických barviv pomocí LC-MS

Autor: David Kohout
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Reverzní vysokoúčinná kapalinová chromatografie s hmotnostní spektrometrií je metoda vhodná pro separaci a identifikaci organických barviv obsažených v předmětech kulturního dědictví. Práce byla cílena na extrakci přírodních barviv z textilních vláken a jejich kvalitativní analýzu. Zkoumanými barvícími zdroji byly kořeny mořeny barvířské (*Rubia tinctorum*), hálky způsobené hmyzem žlabatkou dubovou (*Cynips quercusfolii*) neboli duběnky, těla samiček červce nopálového (*Dactylopius coccus*) neboli košenila. Elektrosprayem ionizované molekuly byly separovány na lineární iontové pasti a detekovány hmotnostním spektrometrem Orbitrap s vysokou rozlišovací schopností. Detekovanými molekulami vyextrahovanými z mořeny byly alizarin, kyselina ruberytrová, lucidin, lucidin primverosid a purpurin. Detekovanými molekulami vyextrahovanými z duběnek byly penta-, tetra-, tri-, di-, monogalloyol glukosid, kyselina gallová a ellagalová. Detekovanými molekulami vyextrahovanými z košenily byly kyseliny karmínová, kermesová a flavokermesová.

Sekce : Technologie restaurování II.

Studium vlastností papírů novodobých knižních fondů

Autor: Bc. Eliška Křečanová
Ročník: M2
Ústav: Ústav technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Petra Vávrová, Ph.D.

Tato práce je zaměřená na studium vlastností papírů novodobých knižních fondů, konkrétně fondů uložených v Národní knihovně ČR z období od roku 1801 do současnosti. Příčiny degradace papírů novodobých knižních fondů nejsou dosud zcela objasněny, protože se jedná o širokou škálu materiálů různého chemického složení. Jedním z významných vnitřních degradačních faktorů těchto papírů je právě chemické složení papírové hmoty použité pro výrobu papíru, a to především obsah ligninu. Na základě průzkumu materiálového, resp. vlákninového, složení novodobých knižních fondů uložených v Národní knihovně ČR v Praze, provedeného pomocí optické mikroskopie a analýzy vlákninového složení papíru, jsme se pokusily vytvořit metodiku mapování zastoupených materiálů ve fondech. Výsledky měření jsme potom srovnávaly s výsledky vlastností papírů získanými pomocí přístroje SurveNIR zapůjčeného z Německa, který na základě chemometrického porovnání naměřeného NIR spektra papíru s databází proměřených vlastností vzorků papírů o známém složení určí vybrané vlastnosti měřeného papíru.

Sekce : Technologie restaurování II.

Interakce spoje sklo-malta a koroze skleněné mozaiky

Autor: Martina Přivřelová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Koroze skla vlivem působení okolního prostředí je jedním z důvodů znehodnocení skleněných mozaikových kamenů tzv. *tesserae*. Fixační lože mozaik je sádrová nebo sádro-vápenná omítka, která je vysoce zásaditá. Z tohoto důvodu *tesserae* po osazení reagují s omítkou za vzniku mezivrstvy, procesem, který je typický pro korozi skla. U některých druhů skla může být vznik mezivrstvy důvodem jejich vypadávání z fixačního lože. Dalším z důvodů degradace mozaik je stárnutí a poškození (např. vzlínající vodou) omítkového podkladu. Cílem této práce bylo zkoumat interakci fixačního lože (sádry) s povrchem skla. K tomuto účelu byl připraven vzorek slepením dvou tabulových skel sádrou. Modelový spoj byl exponován na vzduchu po dobu tří měsíců za laboratorní teploty a vlhkosti (cca 40% RH). Pro urychlení interakce skla a Ca^{2+} iontů byly připraveny modelové testy s expozicí skel do demineralizované vody a roztoků $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ při teplotě 37°C. Interakce skla a roztoků byla sledována jak ve výluzích na změnách hodnot pH a koncentrací SiO_2 , Ca a Na, tak metodou GDS (Glow Discharge Spectrometry), kterou byly sledovány koncentrační profily Na, Si, Ca a Mg na površích skel.

Sekce : Technologie Restaurování II.

Výběr adheziva vhodného pro lepení poškozených pečeti ze včelího vosku

Autor: Štěpán Urbánek
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Dr. Ing. Michal Ďurovič

Projekt – bakalářská práce – byl zaměřen na výběr adheziva vhodného pro lepení historických pečeti ze včelího vosku. Testovaná adheziva byla vybrána na základě literární rešerše, která byla součástí práce.

Čtyřmi vybranými lepidly (Aquazol 500, Lascaux 498 HV, vyzina a damarová pryskyřice) byla lepena zkušební tělesa z čistého včelího vosku a ze směsi včelího vosku s pryskyřicí. Tyto vzorky byly následně podrobeny zkoušce pevnosti v tříbodovém ohybu, rázové zkoušce houževnatosti Charpy a zkoušce reverzibility lepeného spoje. Byla také zkoumána kvalita lomových ploch po rozlomení lepených spojů.

Požadavkům nejlépe vyhověl Aquazol 500, který splnil nároky na snadné vytvoření pevného, ale rozebratelného spoje. Jak lepidlo Lascaux 498 HV, tak damarová pryskyřice tvořily příliš pevný spoj a nesplnily požadavek na rozebratelnost spoje. Pevnost spoje lepeného vyzinou nebyla dostačující a spoj byl velmi dobře rozebratelný.

Sekce : Technologie restaurování II.

Fotochemická degradace celuloidu

Autor: Bc. Petra Urbanová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Pr. Jean-Luc Gardette (Université Blaise Pascal Clermont-Ferrand)

Projekt ALTOCECOL, zaštitěný francouzským ministerstvem kultury, je zaměřen na záchranu památkových artefaktů vyrobených z celuloidu. Výsledkem spolupráce pěti pracovišť (CRCC, ARC-Nucleart, C2RMF, CIRCP a LPMM) by mělo být bližší poznání degradačních mechanismů tohoto materiálu a následné navržení postupů ochrany celuloidových objektů. Celuloid byl poprvé syntetizován v roce 1862 a je považován za první termoplastický polymer. Připravuje se z nitrátu celulózy smíšeného s kafrem jakožto plastifikátorem, případně s dalšími přídatnými látkami a barvivy. Celluloid byl v široké míře využíván jakožto levná náhrada drahých materiálů - slonoviny, želoviny apod.

Pozornost laboratoře fotochemie na Université Blaise Pascal v Clermont-Ferrand, na jejímž výzkumu jsem se podílela, se soustřeďuje zejména na fotochemickou degradaci tohoto materiálu. Modelové vzorky v podobě tenkých filmů byly v pravidelných časových intervalech ozařovány ve speciálně vyvinutých zařízeních simulujících degradaci světlem v reálných podmínkách. Po celou dobu ozařování byly průběžně sledovány změny jejich chemických, optických a mechanických vlastností a vliv použití ochranných povlaků těchto filmů na zpomalení jejich degradace. Hlavními nástroji studia byla UV-VIS a FTIR spektroskopie.

Sekce : Technologie restaurování II.

Stanovení teploty výpalu archeologické keramiky

Autor: Vendula Vlčková
Ročník: M1
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Ing. Petra Zemenová

Tato práce se zabývá problematikou stanovení teploty výpalu archeologických keramických nálezů. Cílem bylo uvést a zhodnotit, jakými metodami lze postupovat při identifikaci teploty výpalu archeologických střepů.

Práce je rozdělena na dvě části. První část je zaměřena na identifikaci produktů tepelného zatížení současných keramických surovin jak plastických, tak neplastických. Součástí byly i testy hydrotermálního zatížení kalcinovaných plastických surovin a jejich následná analýza z hlediska možné změny mineralogického složení. Úkolem druhé části bylo charakterizovat maximální tepelné zatížení různých typů archeologických keramických nálezů: knovízské mísy, trojnožky, amforovité nádoby, glazovaného hrnce a mondidolu. Teplota výpalu nálezů se pohybovala od cca 450 °C (mondidol) až po teplotu přesahující 1000 °C (glazovaný hrnec z pozdního středověku).

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Konzervování archeologických nálezů

Autor: Veronika Žežulková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Víchová, DiS.

Konzervované nálezy pocházejí ze smetištních vrstev ze 16.-19. století nalezených v rámci archeologického výzkumu ve východním traktu divadelního sálu Pražské konzervatoře, Na Rejdišti 1, Praha 1.

Konzervátorské práce byly prováděny v Restaurátorských a konzervátorských dílnách Správy pražského hradu, kde po převzetí následoval mikrobiologický průzkum. Dále byla provedena dezinfekce fragmentů a jejich mokré čištění, které odstranilo zbytky zeminy a jiné nečistoty. Čisté a suché textilní fragmenty se podrobily textilně technologickým rozborům (identifikace vláken, rozbor vazby, dostava nití, zákрут příze, atd.) Zjištění údajů ukázalo rozmanitost typů textilií a jejich vazeb. U fragmentu A4-014 B bylo restaurováno kovové očko.

Všechny fragmenty byly uloženy v PE sáčcích se zipem v hermeticky uzavřených boxech.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování dětské křestní soupravy

Autor: Kristýna Benediktová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Bc. Jana Víchová

Ve své práci se zabývám restaurováním dětské křestní soupravy (čítající křestní kabátek a čepeček) ze sbírek Moravského zemského muzea v Brně.

Restaurování zahrnuje popis předmětů, jejich dokumentaci (technické výkresy, fotografie), průzkum předmětů včetně jejich historického a geografického zařazení. Dále pak identifikaci textilních vláken a textilně technologický rozbor. Poté proces čištění (čištění hedvábné podšívky, bavlněných krajek a odstraňování hnědorezavých skvrn), vyrovnání (popř. tvarová fixace) některých částí předmětů, šicí práce (zejména oprava hedvábných podšívek technikou „sendvič“) a celková adjustace předmětů.

Výstupem z celé práce je restaurátorská zpráva, v níž jsou mj. uvedeny i doporučené podmínky pro uložení v depozitáři a expozici, stejně jako literatura, s níž jsem při procesu restaurování pracovala.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování dámského slunečníku

Autor: Lucie Bubeníková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jaroslava Mandíková

Restaurování bylo provedeno v červnu 2011 během praxe v Muzeu hl. m. Prahy. Slunečník je datován do období kolem roku 1880. Dřevěná rukojeť a kovová kostra byla v dobrém stavu, proto jsem je pouze očistila destilovanou vodou. Textilní součásti slunečníku se skládají z hedvábné podšívky a vrchní hedvábné tkaniny aplikované na tylu. Podšívka i vrchní tkanina byla na mnoha místech mechanicky poškozena. Bylo nutné poškozená místa podložit plombami. K tomuto účelu jsem obarvila pomocné materiály. Dále jsem přichytila části aplikace vytažené z pod řetízku, kterým byla připevněná k tylu. Samotný tyl byl také na mnoha místech poškozen. Tyto místa jsem doplnila obarvenou šicí krepelínou.

Předmět bude uložen v depozitáři naplocho, ve složeném stavu. Aby se zamezilo ostrým skladům na tkanině, bylo z NETEXU (netkaná textilie, 100% POP) vystřiženo kolo, které bylo vloženo do slunečníku.

Po celou dobu restaurování byla prováděna podrobná fotodokumentace a byla zhotovena restaurátorská zpráva.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování živůtku ženského kroje z Hané – „Kordulka“

Autor: Zuzana Hromadová
Ročník: B4
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Víchová, DiS. , Ing. Markéta Škrdlantová, PhD.

Prezentace bude obsahovat popis restaurovaného předmětu, jeho zařazení v historickém a etnografickém kontextu. V další části uvedu stav restaurovaného předmětu po převzetí - typy poškození. V textilně-technologickém průzkumu se budu zabývat rozбором jednotlivých tkanin, rozбором použitých zdobných technologií (výšivka, krajka), včetně technických nákrešů a určení použitých materiálů. Po textilně-technologickém rozboru se zaměřím na postup restaurování - způsob čištění a sušení textilie, příprava pomocných materiálů na restaurování textilie, podložení a překrytí textilie odpovídajícím materiálem v místě biologického napadení a v místě porušené vazby tkaniny, uchycení flotujících nití, odstranění deformace paličkované krajky, fixace paličkované krajky na podkladovou tkaninu. Prezentaci ukončím doporučením podmínek depozice a expozice.

Sekce : Restaurování a konzervování textílií

Restaurování dámských letních šatů

Autor: Ivana Kolarčíková
Ročník: B4
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D

Dámské letní šaty (blůza a sukně) byly zapůjčeny ze sbírek Národního muzea v Praze a jsou datovány do roku 1905. Šaty jsou zhotoveny z batistu v barvě slonové kosti s vetkávanými lesklými puntíky a tiskem šedavé barvy s florálním motivem.

Blůza byla celkově znečištěna prachem a místy se objevovaly skvrny. Strojová i šitá krajka byla bez výrazného poškození. Na přední straně podšívky se nacházela větší perforace. Sukně byla nejvíce poškozena ve spodní části, kde byly velké perforace strojové krajky.

Byl proveden historický a textilně technologický průzkum, identifikace vláken a identifikace kovových materiálů. Na základě výsledků byl navržen postup restaurování.

Postup restaurování: demontáž kovových částí a jejich konzervace, zkouška stálobarevnosti, fixace čísla cykloodekanem, čištění mokrou cestou a následné vysušení pomocí fénu studeným vzduchem, příprava pomocných materiálů, vlastní restaurování – zajištění uvolněných nití na blůze, podložení a skeletáž perforace na podšívce, zpevnění okraje, podložení poškozené strojové krajky ve spodní části sukně.

Během práce byla vytvořena fotodokumentace, kompletní restaurátorská zpráva a navrženy vhodné podmínky uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování textílií

Restaurování krajkového slunečníku

Autor: Zuzana Němečková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jarka Mandíková

Poster se bude týkat restaurování krajkového slunečníku. Práce byla provedena v Muzeu hlavního města Prahy na dvoutýdenní praxi. Poster bude obsahovat:

Základní údaje o slunečníku

Popis poškození slunečníku (+ foto)

Textilně technologické rozborů materiálu. (Zvětšené foto jednotlivých materiálů použitých na slunečníku - kostěná část, kov, krajka, tkanina)

Čištění jednotlivých částí slunečníku – 1. čištění kovových částí a kostí, 2. čištění textilních částí slunečníku (+ foto před a po čištění)

Skeletování protržených míst v bílé hedvábné tkanině

Barvení přidávaného pomocného materiálu

Opravy poškozených částí v krajce (+ foto před a po rest. krajky)

Doporučené podmínky uložení a expozice

Sekce : Restaurování a konzervování textílií

Restaurování dámské krojové vesty

Autor: Petra Ptáčnicková
Ročník: B4
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, PhD.

Cílem restaurování bylo vyčistit předmět, vyrovnat a zajistit všechny flotující nitě, vyrovnat zdeformovanou krajkou a doporučit vhodné podmínky pro uložení předmětu.

Ve své práci uvádím popis a stav předmětu před restaurováním a jeho poškození. Dále se věnuji technické dokumentaci a textilně-technologickému průzkumu. Následuje samotné restaurování předmětu – dámské krojové vesty (kordulky).

Na závěr jsem doporučila vhodné podmínky pro uložení a vystavení předmětu a provedla fotodokumentaci po restaurování.

Sekce : Restaurování a konzervace textílií

Restaurování krajkového vějíře ze sbírek NM

Autor: Kristýna Svěráková
Ročník: B4
Ústav: Ústav chemické technologie památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, PhD., Bc. Jana Víchová, DiS.

Seznámení s restaurátorským zásahem prováděným v roce 2010 v restaurátorské dílně na Vyšší odborné škole textilních řemesel v Praze pod vedením restaurátorky Bc. Jany Víchové, DiS.

Shrnutí prováděných prací, jako je demontáž, čištění a oprava textilních i netextilních částí vějíře, doplněné o fotodokumentaci předmětu před zásahem i po něm. Stanovení podmínek pro uložení a manipulaci s předmětem.

Sekce: Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování a analýzy středověkých keramických nálezů z Ovocného trhu v Praze

Autor: Lucie Cyprisová
Ročník: B3
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Zdena Benedikovičová, restaurátorka MhMP

Při archeologickém výzkumu na Ovocném trhu v Praze 1 v roce 1985 bylo v hloubce 190 – 210 cm pod zemí objeveno několik fragmentů keramických nádob. Tyto střepy byly vyzvednuty, očištěny a uloženy v depozitu Muzea hlavního města Prahy. Po jejich vyhledání z nich byl sestaven jeden hrnec vejčitého tvaru, se zduřelým okrajem a rovným, plochým dnem, jako pojivo byl použit Dispercoll D2. Hrnec je datován do konce 13. století. Dále se zde vyskytovaly fragmenty různých nádob, u kterých byly provedeny analýzy (XRD, XRF) stejně jako u hmoty restaurovaného předmětu (pro zjištění podobnosti střepového materiálu). Cílem práce bylo uvést restaurovaný hrnec světle hnědé barvy o výšce 180 mm a průměru hrdla 118 mm a podstavy 95 mm do stavu určeného k výstavním účelům. Ke zpomalení procesu stárnutí materiálu byly doporučeny vhodné podmínky uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování vitráže z Arcibiskupství pražského

Autor: Pavla Doležalová
Ročník: B4
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Petr Coufal, licencovaný restaurátor

Předmětem práce bylo restaurování vitráže s rostlinným motivem. Na vitráži byla shledána následující poškození: (a) vlivem degradace olověného profilu došlo k posunutí a rozpojení olověné sítě, (b) sklo bylo silně zanesené nečistotami a (c) jeden skleněný segment byl popraskán.

Cílem práce bylo provést restaurátorský průzkum, navrhnout postup restaurátorských prací a jejich realizace. V rámci průzkumu byla provedena řada analýz. Na základě jejich výsledků byl bílý nános na skle identifikován jako uhličitán vápenatý. Barva použitá na sklomalbu obsahovala typickou složku těchto materiálů – oxid olovnatý; dále byly zastoupeny ve větší míře oxid křemičitý, oxidy chromu, železa a zinku. Chemické složení žlutého skla bylo charakterizováno jako sodno-vápenaté s dobrou chemickou odolností. V místech, kde byly okraje skleněných fragmentů překryty olověnou sítí, byly nalezeny zbytky pilin, korozní produkty olova a další krystalické fáze. Vitráž byla po zrestaurování uložena v depozitáři.

Sekce: Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování míšeňského porcelánu

Autor: Tereza Hüttnerová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Magdalena Velebilová, licencovaná restaurátorka

Náplní práce bylo zrestaurování porcelánového hlubokého talíře míšeňské manufaktury pocházející z 20. století. Identifikace výrobce předmětu proběhla podle značky - vyobrazení dvou zkřížených mečů na podělní. Talíř byl rozlomen na devět větších a tři menší stěpy. Největší poškození vykazoval především v oblasti nožky, podělní a horní části festonového okraje. Na glazuře byly na první pohled patrné škrábance. Celý povrch byl pokryt mastným povlakem a skvrnami, které bylo nutné odstranit vhodnými prostředky. Dále bylo důležité vybrat vyhovující lepidlo s ohledem na požadavky související s pevností spojů. Jako nejvhodnější adhezivo pro tuto práci byla určena epoxidová pryskyřice Hxtal NYL-1 splňující tyto vlastnosti, která však není zcela reversibilní. Pro doplnění chybějících míst byl zvolen dvousložkový epoxidový tmel Milliput. Barevná retuš byla provedena barevnými práškovými pigmenty rozpuštěnými v epoxidové pryskyřici Hxtal NYL-1. Z talíře byly odebrány vzorky určené pro analýzu rentgenové fluorescence (XRF) a rentgenové difrakce (XRD) stěpové hmoty. Identifikovány byly také nadglazurní a podglazurní vrstvy. Výsledky XRF a XRD byly porovnány s již dříve zrestaurovaným míšeňským talířem.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Konzervátorsko-restaurátorský revizní zásah na souboru lahví s vnitřním prstencem

Autor: Lucie Jeníková
Ročník: B4
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Aranka Součková – Daňková, licencovaný restaurátor

Během archeologického výzkumu uskutečněného roku 1996 v jižní straně náměstí Přemyslovců č.p. 16 v Nymburku byly nalezeny části skleněných nádob, mezi nimiž byl i soubor lahví s vnitřním prstencem, datovaný do konce 13. století. Stěpy tohoto souboru byly v roce 1996 evidovány, očištěny, vyhledány a shledány v celkovém počtu pěti lahví, které byly dále kresebně zdokumentovány a uloženy v režimu preventivní konzervace.

Takto dříve zpracovaný soubor byl mnou převzat k reviznímu zásahu, jehož cílem bylo zhodnotit stav skleněných fragmentů, vhodnost dosavadních podmínek uložení a posoudit správnost provedených rekonstrukcí.

V rámci restaurátorského průzkumu byla hodnocena homogenita a barva skla vizuálně i pomocí binokulární lupy. Na základě nového pozorování, revizní konzervace a výsledků získaných metodou EPMA bylo zjištěno, že původní rekonstrukce skleněných nádob nebyly provedeny správně (skleněné fragmenty přiřazené k jedné lahvi se lišily chemickým složením). Bylo přistoupeno k lepení jednotlivých celků pomocí 40 % roztoku Paraloidu B-72 a vybrané celky byly usazeny na PMMA kříže. Nedílnou součástí práce bylo navržení nových podmínek uložení a doporučeného způsobu manipulace.

Sekce: Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování keramických nádob ze sbírek Muzea hlavního města Prahy

Autor: Kumstová Veronika
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Zdena Benedikovičová, restaurátorka MhmP

Předmětem práce bylo restaurování dvou nádob ze sbírek Muzea hlavního města Prahy. První nádoba - pravěká hluboká mísa (terina) nalezená v Praze v Dejvicích a datována do 5. - 6. století n. l. byla již dříve restaurována a bylo zapotřebí ji rozlepit, odstranit sádrové doplňky a nečistoty. Druhá nádoba - hrnek s uchem, s tzv. rádýlkovým dekorem pochází z doby vrcholného středověku z cca 15. stol. n. l. Byl ve fragmentárním stavu bez předešlého restaurátorského zásahu. Střepy byly bez nečistot a byly stabilní. V obou případech byly očištěné a vyhledané střepy lepeny lepidlem Dispercoll D2. Chybějící střepy byly doplněny sádrou. Ztráty byly u teriny dobarveny obarveným latexem na požadovaný odstín. U hrnku byl vytvořen optický dekor. Z nádob byly odebrány vzorky, které byly použity na zhotovení výbrusů pro optickou mikroskopii a pro analýzu střepové hmoty (XRD, XRF). Optická mikroskopie potvrdila orientaci střepové hmoty - vytváření točením na kruhu. Mineralogickou analýzou byla stanovena teplota výpalu nádob v intervalu v rozmezí 800 - 950 °C.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování archeologické keramiky z Lažan

Autor: Jitka Seifertová
Ročník: B3
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Ljuba Svobodová, licencovaná restaurátorka ARÚ AV ČR, Praha, v.v.i.

Při archeologickém výzkumu v obci Lažany byl v odpadní jímce nalezen dobře zachovaný střepový materiál, který byl součástí většího souboru asi 17- ti nádob. Bylo zjištěno, že se jedná o tři nezdobené středověké hrnce točené na kruhu, z nichž jeden je na dně označen kolkem. Všechny tři nádoby jsou datovány do 13. století.

Nejprve byly dohledány střepy patřící k jednotlivým nádobám. Současně byly odebrány vzorky jak ke zhotovení výbrusů, tak k rentgenografickým analýzám, které poskytly informace o chemickém a mineralogickém složení. Výsledky byly porovnány s již známými daty příslušejícími dalším nádobám. Bylo prokázáno, že se jedná o podobné střepové hmoty a teplota výpalu je v rozmezí 600-850 °C. Jednotlivé nádoby byly restaurovány. Střepy byly slepeny a chybějící části z důvodu konsolidace doplněny sádrou. Dle etiky restaurování byly použity plně reverzibilní materiály.

V souvislosti se stavem střepového materiálu a s materiály použitými při restaurování byly navrženy vhodné podmínky uložení a vhodný způsob manipulace s předměty.

Sekce: Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování středověkých kachlů

Autor: Tereza Syrovátková
Ročník: B4
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Zdena Benedikovičová, restaurátorka MhMP

Předmětem této práce bylo restaurování dvou středověkých kachlů. První – tyglíkovitý, režný, čtyř-hraný kachel z 16. století byl před restaurováním uložen v depozitáři Muzea hlavního města Prahy. Druhý glazovaný kachel je z výzkumu Salmovského paláce čp. 186/IV na Hradčanském náměstí v Praze. Tento kachel je pokryt zelenou glazurou a zdoben reliéfním dekorem. V rámci restaurování byly kachle očištěny a slepeny disperzním lepidlem Dispercoll D2. U kachlů byla doplněna chybějící místa sádrou a provedena barevná retuš. U obou předmětů byly k zjištění chemického a mineralogického složení použity XRD a XRF analýzy u glazury i SEM/EDS. Stanovením mineralogického složení byla získána přibližná teplota výpalu střeptových hmot. U druhého kachle byla z výbrusu hodnocena tloušťka povrchových úprav a zjištěno jejich poškození. U obou restaurovaných kachlů byly doporučeny vhodné podmínky pro uložení a způsob manipulace.

Sekce : Restaurování a konzervace kovů

Restaurování čtyř nádobek na vonné oleje s etujemi

Autor: Andrea Černá
Ročník: B4
Ústav: Ústav kovovým materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová



Cílem práce bylo restaurování a konzervování dvou dřevěných etují s textilní výstelkou se čtyřmi nádobkami. Soupravy vyrobené kolem r. 1900 pocházejí z kostela sv. Vavřince v Jablonném pod Ještědím. Nádobky na vonné oleje byly vyrobeny technikou kovotlačitelství.

Nádobky byly prohlédnuty stereoskopickým mikroskopem. Prvková analýza odebraných vzorků použitých materiálů byla provedena elektronovým

rastrovacím mikroskopem TESCAN Vega 3 s EDS analyzátozem Oxford Instrument INCA 350. Složení korozních produktů bylo stanoveno metodou RTG difrakční analýzy. Dřevěné etuje prohlédla Ing. Irena Kučerová Ph.D. Analýza vláken z výstlepek etují byla provedena na polarizačním světelném mikroskopu Olympus BX60.

Nádobky jsou vyrobeny z pozlacené mosazi. Etuje jsou vyrobeny ze dřeva jehličnatého stromu a potaženy černým papírem s raženým vzorem, uvnitř se nachází bavlněné výstelky.

Etuje byly očištěny od prachu a nečistot. Odřený a potrhaný papír byl zpevněn, byly vsazeny nové chybějící části papíru. Z kovových částí etují byly mechanicky odstraněny korozní produkty. Nádobky byly očištěny od zbytků olivových olejů. Korozní produkty z nádobek byly mechanicky odstraněny pomocí plstěných kotoučů. Byla provedena konzervace Paraloidem B72. Byl navržen ochranný režim s ohledem na další využití památky v liturgické praxi.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Nádoba na svěcenou vodu

Autor: Jaroslav Hoskovec
Ročník: B4
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová



Práce pojednává o restaurování nádoby na svěcenou vodu, která je majetkem Národního muzea v Praze. Věnuji se v ní výrobním technologiím nádoby a mnohonásobným druhotným opravám. Historický průzkum předmětu je podložen chemickými analýzami z elektronového rastrovacího mikroskopu HITACHI S- 450 s EDS analyzátozem a informacemi z popsanych struktur použitých materiálů ze zhotovených metalografických výbrusů. Dále v ní mapuji poškození, druhotné zásahy a opravy dokladané výše uvedenými metodami. Na základě restaurátorského průzkumu byl vypracován restaurátorský zásah. Chemické čištění měděné nádoby bylo realizováno 5% roztokem kyseliny sírové a lokální pocínovaná místa byla očištěna 5% roztokem NaOH lokálním tamponováním. Korozní produkty železa v oblasti druhotných oprav byly odstraněny 10% kyselinou šťavelovou a dočištěny použitím vzduchové frézky a tryskáním balotinou B197. Po očištění byla poškozená místa nádoby zpevněna měděnými vložkami, které byly vlepeny z vnitřní strany předmětu epoxidovým lepidlem ATECO Quick Epoxi Steel. Povrch nádoby byl sjednocen pomocí roztoku polysulfidu sodného. Předmět byl konzervován akrylátovým lakem Paraloid B72 rozpuštěným v toluenu 1:10. Ochranný režim předmětu byl navržen s ohledem na jeho uložení v depozitáři Národního muzea v Praze.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování renesančního zámku

Autor: Václav Nikendey
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stouřil, Ph.D., Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Předmětem restaurování byl železný renesanční dveřní zámek ze sbírkového fondu Uměleckoprůmyslového muzea. Předmět byl podroben restaurátorskému průzkumu, kterým byla zjištěna technologie výroby restaurovaného předmětu, rozsah a klasifikace na něm použitých zdobných technik. Z odebraných vzorků byla pomocí skenovacího elektronového mikroskopu HITACHI S-450 s EDS analyzátozem KEVEX DELTA 5 provedena kvantitativní analýza složení povrchových úprav na předmětu. Metalografickým rozbozem materiálu byla určena technologie výroby a zpracování materiálu. Samotný restaurátorský zákrok byl proveden otryskáním povrchu předmětu, především jednotlivých součástí zámkového mechanismu, který vedl k odstranění korozních produktů. Dále došlo k odstranění nepůvodních zásahů v místě technických spojů za tvarově shodné kopie. Pasivace povrchu byla následně provedena v roztoku dekananu s následnými oplachy a sušením předmětu. Konzervace byla provedena nátěrem dvěma vrstvami včelího vosku s jeho následným okartáčováním, pro dosažení maximálně kompaktního povlaku.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Korunka na Jezulátko

Autor: Zuzana Pecenová
Ročník: B4
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií



Korunka na Jezulátko pochází ze začátku 18. století. Mosazná korunka se skládá z několika částí, které jsou navzájem snýtovány mosaznými a železnými nýty. Korunka je dekorována imitací kamenů, cizelováním a místy je postříbřena a pozlacena. Na korunce chyběly některé imitace kamenů a vrcholový nimbus.

Nejprve byla korunka demontována odstraněním železných a mosazných nýtů a byly odšroubovány kamenné imitace. Jednotlivé části byly očištěny namáčením v 5% kyselině sírové a opracováním jemným mosazným kotoučkem smáčeným mýdlovou vodou (vše s ohledem na povrchovou úpravu). Poté byly vytvořeny nové obruby na skleněné imitace z mosazného plechu o síle 0,7 mm. Byl vytvořen také vrcholový nimbus, podle vzoru z jiných korunek. Také z mosazného plechu.

Konečná montáž byla provedena pomocí šroubů a matic, oproti původním nýtům. Stejně byly přišroubovány i nové obruby s imitacemi a vrcholový nimbus.

Celek byl zakonzervován nátěrem Paraloidu B72.

Sekce : Restaurování a konzervace kovů

Dverný zámek

Autor: Martin Poništ
Ročník: B4
Ústav: 148
Školitel: Ing. Jan Stoužil, Ph.D.; Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií



V rámci práce byl restaurován dveřní zámek z kostela farnosti Stará Bystrica. Po demontáži zámku byl povrch odmaštěn nitroředidlem a byly také odstraněny korozní produkty tamponáží 5 % roztoku Chelatonu 3. Následovala stabilizace povrchu ponorem v roztoku dekananu. Po zpětném smontování předmětu byla aplikována finální konzervační úprava. Ta spočívala v nanesení včelího vosku rozpuštěného v technickém benzínu a následném rozleštění za tepla.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Barokní monstrance

Autor: Petra Witoszková

Ročník: B4

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc., Ivan Houska, restaurátor s licencií, RNDr. Tomáš Řídkošil

Monstrance je z 18. století, patřila k liturgickým předmětům používaných v Dómu svátého Václava v Olomouci. Monstrance stojí na prolamované čtyřlaločné noze zdobené rokajem a dvěma páry hlav andílků. Nad nodem je tělo, které tvoří gloriola ze žlutého kovu a prosekávaný plech bílé barvy s rostlinnými motivy obilí, hroznů a pásku rozvilin. Uprostřed těla monstrance je okruží ve tvaru srdce, tvořené obláčkovým motivem s paprsky. Ve spodní části těla monstrance je zlacená hlava anděla a v horní části zlacená koruna osazená čtyřmi kameny. Prvkové složení bylo zkoumáno metodou rentgenové fluorescence - ED XRF spektrometrem ve Středočeském muzeu na přístroji ElvaX Industrial. Z výsledků prvkové analýzy je možné posoudit, že základním kovem jednotlivých dílů monstrance je mosaz. U postříbřených i pozlacených částí byla detekována přítomnost rtuti, což prokazuje žárové pokovení předmětu. Nečistoty a mastnoty byly odstraněny v ultrazvukové vodní lázni s přídavkem detergentu. Po zrestaurování částí monstrance (vyrovnání deformací, přichycení čelního okruží, sjednocení spojovacího materiálu, přeleštění povrchu plavenou křídou s čpavkovou vodou) byl povrch zakonzervován transparentním akrylátovým konzervačním lakem Paraloid B27 rozpuštěném v xylenu (10% roztok). Předmět by měl být uložen při teplotě s minimálními výkyvy. K odstraňování prachových částic z povrchu monstrance doporučuji použít pouze suchý bavlněný hadr.